

ZIB

**KONRAD-ZUSE-ZENTRUM  
FÜR INFORMATIONSTECHNIK BERLIN**  
JAHRESBERICHT 2009

## VORWORT

Wie in den vorigen Jahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz: Zuse-Institut Berlin (ZIB), auch für 2009 seinen Jahresbericht vor – diesmal aber in einem neuen Gewand! Grund für diese Neuerung ist, dass das bisherige Format im Laufe der Jahre aus allen Nähten geplatzt war – mit dem Effekt, dass die Übersicht auch für gutwillige Leser verloren gegangen war. Im neuen Konzept stellen wir Ihnen nun nur noch ausgewählte Leuchtturmprojekte aus unseren Abteilungen vor, detaillierte Hintergrundinformationen finden sich dann in unseren Webseiten, die wir ebenfalls einer gründlichen Überarbeitung unterzogen haben. Diese Neuerungen sind zugleich ein Zeichen, dass sich das ZIB mit unserer neuen Administrativen Geschäftsführerin, Frau Annerose Steinke, nach außen farbiger, straffer und klarer darstellen und für einen breiteren Leserkreis öffnen will.

Auch im vergangenen Jahr war das ZIB erfolgreich in einer Fülle von Projekten aus den Anwendungsschwerpunkten der Mathematik und Informatik: im Bereich Numerische Mathematik z. B. in der virtuellen Medizin, der mathematischen Systembiologie, des mathematischen Molekül-Entwurfs sowie der Visualisierung und Datenanalyse; im Bereich Diskrete Mathematik z. B. in der Optimierung von Gasnetzen, der Verkehrsplanung und Logistik; im Bereich Informatik z. B. mit den Themen verteiltes Datenmanagement, Skalierbarkeit und hardwarenahe Algorithmen.

Auch 2009 war das ZIB wiederum außerordentlich erfolgreich in der Einwerbung von Drittmitteln, mit 6.476 TEuro dem besten Ergebnis in unserer Geschichte. Dabei haben die Aufträge aus Wirtschaft und Industrie kräftig zugelegt (um 763 TEuro). In diesen Zahlen drückt sich aus, dass das Institut in wachsendem Maße ein gefragter und erfolgreicher Partner für innovative Unternehmen ist. Generell spielte das ZIB weiterhin eine wichtige Rolle als „ehrlicher Makler“ in zahlreichen Verbundprojekten mit den drei Berliner Universitäten TU, FU und HU sowie mit der Charité und vielen außeruniversitären Forschungseinrichtungen. Das DFG-Forschungszentrum MATHEON, das vom ZIB gemeinsam mit TU, FU, HU und WIAS getragen wird, wurde zu Beginn dieses Jahres von einer internationalen Gutachtergruppe positiv evaluiert; unter den international als herausragend beurteilten Themen sind solche, bei denen das ZIB aktiv beteiligt ist. Am 30. April 2010 hat der Senat der DFG die Bewilligung zur Förderung des MATHEON für weitere vier Jahre beschlossen. Zugleich eröffnete eine 2009 von den fünf Trägerinstitutionen unterzeichnete Verwaltungsvereinbarung die Möglichkeit einer Weiterführung des MATHEON jenseits einer dritten Förderperiode.

Erfolgreiche Verbundprojekte, die im Bereich „Service“ des ZIB angesiedelt sind, sind weiterhin der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV), das landeseigene Wissenschaftsnetz BRAIN sowie zahlreiche GRID-Projekte.

Im Jahr 2009 wurde eine weitere Ausbaustufe des HLRN-II Supercomputers in Betrieb genommen. Die Rechenkapazität der Maschine wird bereits so stark nachgefragt, dass auch 2009 nicht alle Anfragen potentiell interessierter Nutzer aus der Wissenschaft befriedigt werden konnten. Für den Ausbau der Archivierung wissenschaftlicher Daten erhielt das ZIB im Jahr 2009 Mittel aus dem Konjunkturprogramm II; diesen hochwertigen Service können wir deshalb nun auch externen Berliner Forschungseinrichtungen anbieten.

Der Wissenschaftliche Beirat des ZIB tagte am 29. und 30. Juni 2009. Auch für dieses Berichtsjahr stellte er dem Institut ein eindrucksvolles Zeugnis aus. Insbesondere lobte er die wachsende Zusammenarbeit zwischen Forschung und Industrie mit den Worten „Das ZIB schafft durch seinen integrierten Ansatz, was Berlin schon immer wünscht.“ Wir nehmen das als Ansporn für die vor uns liegenden Jahre.

Berlin, im Mai 2010

*P. Deuflhard*

Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuflhard  
Präsident

## IMPRESSUM

### Herausgegeben vom

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Takustraße 7  
D-14195 Berlin-Dahlem

T +49(0)30-841 85-0  
F +49(0)30-841 85-125

bibliothek@zib.de  
www.zib.de/bib/pub/index.de.html

Gestaltung:  
CB.e Clausecker | Bingel. Ereignisse AG, Agentur für Kommunikation

ISSN: 0934-5892

© 2010 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



ClimatePartner  
**klimateutral  
gedruckt**

Die CO<sub>2</sub>-Emissionen dieses Produkts wurden durch CO<sub>2</sub>-Emissionszertifikate ausgeglichen.  
Zertifikatsnummer: 425-53160-0410-1088  
www.climatepartner.com



Gebäude des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin in Berlin-Dahlem

## INHALT

4	Executive Summary
6	Konrad Zuse – der Namenspatron des ZIB
8	Die Geschichte des ZIB-Logos
9	Zuses Werk weiterdenken
10	Das Zuse-Institut-Berlin „Schnelle Algorithmen – Schnelle Rechner“
12	Gliederung der wissenschaftlichen Bereiche
14	Organisationsstruktur des ZIB
16	Wirtschaftliche Situation
18	Organisation
21	Spin-off-Firmen
<hr/>	
22	<b>NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG</b>
26	Eine neue Sicht der Konformationsdynamik
28	Krebstherapie – Regionale Hyperthermie
30	Echtzeitsimulation nano-optischer 3D-Strukturen
32	Mathematische Systembiologie – Modellierung und Simulation des weiblichen Hormonzyklus
34	Projekte der Abteilung Numerische Analysis und Modellierung
<hr/>	
36	<b>VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE</b>
40	Merkmalsextraktion und Visualisierung für Strömungsfelder
42	Modellgestützte Anatomierekonstruktion
44	3D-Rekonstruktion von großen neuronalen Netzen
46	Topologische Analyse Diskreter Daten
48	Projekte der Abteilung Visualisierung und Datenanalyse
<hr/>	
50	<b>OPTIMIERUNG</b>
54	ZIB Optimization Suite
58	Das Kommunikationsnetz der deutschen Wissenschaft
60	Effizienter Alpentransit durch den Simplontunnel
62	Projekte der Abteilung Optimierung
<hr/>	
64	<b>WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION</b>
68	Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für Museen
70	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
72	Projekte der Abteilung Wissenschaftliche Information und KOBV
<hr/>	
74	<b>PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME</b>
78	XtreemFS: ein skalierbares, globales Dateisystem
80	Scalaris – Transaktionen in verteilten, strukturierten Overlay-Netzwerken
82	Schnell und energiesparend – Neue Technologien für das HPC
84	Statistische Modellierung für verlässliche Computersysteme
86	Projekte der Abteilung Parallele und Verteilte Systeme
<hr/>	
88	<b>SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE</b>
90	Der HLRN-II Supercomputer am ZIB
92	HLRN-Fachberatung und Supercomputing
94	IT-Service
96	Zentrale Datenhaltung im Zuse-Institut Berlin
98	BRAIN – Das Berliner Wissenschaftsnetz
<hr/>	
100	<b>FAKTEN UND ZAHLEN</b>
103	Mehr als „nur“ Wissenschaft und Forschung – Veranstaltungen des ZIB für Kinder, Jugendliche und Studierende
104	Auszeichnungen und Rufe
105	Publikationen
113	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern
125	Tagungen und Gäste am ZIB
128	Software und Service

## EXECUTIVE SUMMARY

### FAST ALGORITHMS – FAST COMPUTERS

In the course of the more than twenty years of its existence, the Zuse Institute Berlin (ZIB) has become an international trademark. Driven by challenging applications from science and engineering, economy, or information technology – preferably at the present border of computational complexity – our focus is on the theoretical derivation and practical development of efficient algorithms and their analysis. Our pride is in superceding the technological speed-up of computers by the computational speed-up through our algorithms – and eventually in adding to both of them. In the best spirit of our namesake Konrad Zuse we do not cultivate any segregation between mathematics and computer science: On its top level, our structure is divided into the research areas *Numerical Mathematics*, *Discrete Mathematics*, and *Computer Science* – each headed by a professorship fully integrated into one of the universities FU, TU, and HU. In each of these areas we develop fast algorithms applicable and actually applied in hard real-life problems. In a bunch of collaborative joint projects, ZIB understands its role as that of an honest enabler aiming at a win situation for all partners. Perhaps the most visible one among these projects is the DFG Research Center MATHEON, where ZIB is one of the five supporting institutions (besides the mathematics faculties at TU, FU, HU, and WIAS).

In close connection with computer science research, we work hard to deliver top quality service in high performance computing at our fast computer, to which only top scientists get access. Once users have passed the filter of the external Evaluation Committee, they are supported by our internal “HPC pilots”. A further highly visible service, also closely coupled with research, is performed by our *Scientific Information Systems* department.

### NUMERICAL MATHEMATICS

This area divides into the departments *Numerical Analysis and Modelling* and *Visualization and Data Analysis* thus covering the main research fields necessary for scientific and engineering computing.

Out of the 2009 highlights from *Numerical Analysis and modelling* we just mention three. (a) Our function space oriented adaptive nite element methods together with recent theoretical results on non-convex, state and control constrained optimal control problems allowed us to reach a final state in the planning of the cancer therapy regional hyperthermia; our corresponding software is now ready to be handed over to the clinical environment. (b) Our concept of conformation dynamics has grossly matured on the basis of new theoretical results so that “real” drug design came into reach of our algorithms. For example, a potential pain relief drug has been designed in our computers that is presently under in-vitro and in-vivo testing at Charite (patent pending). (c) Based on our mathematical “pole condition” concept an adaptive PML-method has been worked out that has proved to be a genuine door-opener for nano-optical components.

From the many 2009 highlights in *Visualization and Data Analysis* let us also just mention three. (a) As in 2008, we again won the first prize in the international MICCAI competition on automatic segmentation; our software tools are now as good as a human expert. (b) The close cooperation with the Max-Planck Institutes in Martinsried and in Florida has drastically intensified, especially in the field of neuronal networks with their challenging multiscale structure. Particular recent progress has been made in the extraction microtubuli (certain cellular structures) on the basis of electron tomography. (c) In cooperation with a former spin-off company, we developed improved versions of our worldwide reputed software environment **Amira**.

### DISCRETE MATHEMATICS

The decision made by the Department of Optimization many years ago to independently develop software for the solution of mathematical optimization problems has proved to be farsighted and extremely important. An outstanding example in this context is **SCIP**, a toolbox for the solution of mixed-integer programs (MIPs), which successfully integrates techniques for so-called constraint programs and SAT problems into the MIP methodology (cutting planes, etc.). The innovative **SCIP** development has gained the attention of academic and commercial users and was honoured by very prestigious international scientific awards. Together with the LP solver **SoPlex** and the modeling language **ZIMPL**, **SCIP** forms the basis of the ZIB Optimization Suite, which we are currently expanding to also include nonlinear and stochastic components and massive parallelization. The entire development is driven by extremely exciting research projects in transportation, logistics, traffic, telecommunication, and energy, in which new and challenging scientific questions arise. Due to the flexible **SCIP** design we can integrate our research results without difficulty into problem-specific codes. Nearly all of the practical problems we investigate are of sizes that lie far beyond the reach of standard software. It is therefore necessary to develop special techniques based on problem-specific mathematical research (polyhedral combinatorics, non-differentiable optimization, graph-theoretical algorithms). In our projects, the analysis of practical questions, mathematical theory, the development of special-purpose software, and the implementation into general solution tools are treated in an integral way. This enables us to face great challenges from practice with a good chance of success.

### COMPUTER SCIENCE

This area performs research on the theory and practice of parallel and distributed systems and provides services for high performance computing and long-term data storage.

The research highlights in 2009 include new algorithms for our distributed data management systems **XtreemFS** and **Scalaris**. Both have been developed in-house over several years and they now serve as research platforms for the verification of new theoretical concepts. **XtreemFS** is an object-based file system with replication and striping for fast data access in Grid environments. Our fault-tolerant FLeases protocol for negotiating leases among storage devices uses a modified Paxos protocol to achieve consensus on concurrent accesses to replicated data. Log-structured merge trees manage meta-data and enable consistent snapshots for distributed backups.

Our second distributed data management system, **Scalaris**, is not a full-fledged database, but a key/value store. With its unique transaction layer, it is worldwide the only key/value store that provides strong data consistency with transactions on overlay networks. Interestingly, Amazon, which used to promote ‘eventual data consistency’ as sufficient for most applications, just recently (March 2010) announced to also support strong consistency in their SimpleDB.

Since August 2009, when the second part of the HLRN supercomputer was installed, our supercomputing department hosts – for the first time – more than 10.000 processor cores. With the help of our “HPC pilots” many users were able to adapt their applications to efficiently utilize several thousand processors. Along with the increase in computing capacity, we also extended our data archive to ten PetaByte of tape storage.

## KONRAD ZUSE – DER NAMENSPATRON DES ZIB

Konrad Zuse, geboren 1910 in Berlin, ist der Namenspatron des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB). Nach dem Abitur studierte er Maschinenbau und Architektur am Vorläufer der heutigen TU Berlin. Mit der Z3 entwickelte er 1941 den weltweit ersten frei programmierbaren Computer. Nach Ende des Zweiten Weltkriegs baute er seine eigene Firma auf, die Zuse KG. Nach seiner Pensionierung widmete er sich vermehrt seiner zweiten Leidenschaft: der Malerei. Konrad Zuse, der selbst nie promoviert hat, erhielt zahlreiche Ehrendoktoren und Auszeichnungen. Er verstarb 85-jährig in Hünfeld bei Fulda. Im Jahr 2010 wird anlässlich des 100. Geburtstages von Konrad Zuse mit vielen Veranstaltungen deutschlandweit an sein Wirken erinnert.



Konrad Zuse, heute bekannt als der Erfinder des weltweit ersten frei programmierbaren Computers, ist der Namenspatron des ZIB.

### BERUFUNG ZWISCHEN KUNST UND TECHNIK

Konrad Zuse wurde 1910 in Berlin geboren. Er besaß eine ausgeprägte Begabung für Technik und Kunst und machte schon als Kind erste intelligente Erfindungen. So entwarf er bereits in der Schulzeit ein Straßensystem für seine visionäre Zukunftsstadt, inspiriert durch den Film „Metropolis“ (unser heutiges ZIB-Logo). Er versuchte sich an einem „automatisierten Fotolabor“ und an einem „Geld wechselnden Warenautomaten“.

1928 legte er sein Abitur in Hoyerswerda ab und nahm an der Polytechnischen Hochschule Berlin-Charlottenburg (Vorläufer der TU Berlin) zunächst das Studium des Maschinenbaus auf, wechselte dann aber schnell zur Architektur und schließlich zum Bauingenieurwesen. Diese Kombination deckte beide Interessengebiete ab, die ihm wichtig waren, damit konnte er zugleich Ingenieur und Künstler sein.

### COMPUTERBAU IM WOHNZIMMER

Nach dem Abschluss seines Ingenieurstudiums arbeitete er als Statiker bei den Henschel Flugzeugwerken in Schönefeld, gleichzeitig baute er im Wohnzimmer seiner Eltern eine „Erfinderkunstwerkstatt“ auf. Er sammelte Geld von Freunden und in der Familie, um das Werkzeug und die Bauteile bezahlen zu können. Das Resultat war der 1938 fertig gestellte, zunächst noch vollmechanische, programmierbare Ziffernrechner Z1, der seine Befehle von Lochstreifen ablas. Erstmals verwendet er das binäre Zahlensystem, um die Programme zu steuern. Der Ingenieur Zuse verstand schon früh die Einheit von arithmetischen und logischen Operationen. Das Versuchsmodell Z1 war wegen der in der Praxis fehlenden Genauigkeit seiner mechanischen Bauteile jedoch nie funktionsfähig.

1940 erhielt er von der Aerodynamischen Versuchsanstalt (Göttingen) Unterstützung. Er baute die Z2, eine verbesserte Version der Z1 mit Telefonrelais, im gleichen Jahr gründete er die „Zuse Apparatebau“, um programmierbare Rechner herzustellen. Es folgte 1941 die Entwicklung der Z3 in einer kleinen Wohnung in der Berlin-Kreuzberger Methfesselstraße. Die Z3 gilt heute als erster funktionstüchtiger Computer der Welt. Zwischen 1945 und 1947 entwickelte Konrad Zuse auch den Plankalkül, die erste objektorientierte Programmiersprache der Welt, die allerdings erst Jahrzehnte später publiziert wurde.

### KONRAD ZUSE ALS UNTERNEHMER

1945 wurde die Z3 durch Bomben zerstört. Die zu diesem Zeitpunkt teilweise fertig gestellte Z4 war rechtzeitig von seinen Mitarbeitern zerlegt, verpackt und nach Süddeutschland, in ein Dorf im Allgäu, in Sicherheit gebracht worden. Dort besuchten ihn die Schweizer Mathematiker Eduard Stiefel und Christian Rutishauser und schauten sich den Rechner an, der in einer Scheune stand. Die Z4 war die einzige in Europa verfügbare Maschine. Konrad Zuse erhielt 30.000 Franken, die Z4 wurde fertig gestellt und an der ETH Zürich installiert. Es war das erste Mal, dass ein Rechner seinem Schöpfer wirtschaftlichen Erfolg bescherte.

1949 gründete Konrad Zuse in Neukirchen die Zuse KG. Bis 1967 baute die Firma insgesamt 251 Computer. 1964 verließ Konrad Zuse sein Unternehmen, es wurde zunächst von der BBC Mannheim, Anfang 1967 dann von Siemens übernommen.

### DER KÜNSTLER KUNO SEE

Nach seiner Pensionierung widmete er sich seiner zweiten großen Leidenschaft – der Malerei. Unter dem Pseudonym „Kuno See“ schuf er abstrakte Bilder und Portraits berühmter Zeitgenossen. Zwei seiner Bilder hängen heute in den Räumlichkeiten des ZIB.



Konrad Zuse erhielt zahlreiche Würdigungen, u. a. wurden ihm das Bundesverdienstkreuz, zahlreiche Ehrendokortitel und zwei Ehrenprofessuren verliehen. Er erlebte die Vorplanungen für das neue Gebäude des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin noch mit, ein Jahr nach seinem Tod wurde das neue Gebäude in Berlin-Dahlem eingeweiht.

### Quellen

Konrad Zuse, *Der Computer: Mein Lebenswerk*, Berlin 1984.

Wolfgang K. Giloi, *Die Ungnade der frühen Geburt*. Vortrag, gehalten am 12.12.1996 in memoriam Konrad Zuse.

Jürgen Alex, Hermann Flessner, Wilhelm Mons, Horst Zuse: *Konrad Zuse: Der Vater des Computers*. Fulda 2000.

Raul Rojas (Hrsg.): *Die Rechenmaschinen von Konrad Zuse*. Springer, Berlin 1998.

Hadwig Dorsch: *Der erste Computer. Konrad Zuses Z1 – Berlin 1936. Beginn und Entwicklung einer technischen Revolution*. Mit Beiträgen von Konrad Zuse und Otto Lührs. Museum für Verkehr und Technik, Berlin 1989.

Clemens Kieser: *„Ich bin zu faul zum Rechnen“ – Konrad Zuses Computer Z22 im Zentrum für Kunst und Medientechnologie Karlsruhe*. In: Denkmalpflege in Baden-Württemberg, 4/34/2005, Esslingen am Neckar, S. 180-184.

Arno Peters: *Was ist und wie verwirklicht sich Computer-Sozialismus: Gespräche mit Konrad Zuse*. Verlag Neues Leben, Berlin 2000.

Paul Janositz: Informatik und Konrad Zuse: *Der Pionier des Computerbaus in Europa – Das verkannte Genie aus Adlershof*. In: Der Tagesspiegel Nr. 19127, Berlin, 9. März 2006, Beilage Seite B3.

Friedrich Christian Delius: *Die Frau, für die ich den Computer erfand*. Biographischer Roman, Rowohlt, Reinbek bei Hamburg 2009.

## DIE GESCHICHTE DES ZIB-LOGOS



Das auf das Deckblatt geprägte Logo des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB) ist nicht irgendein Design-Element – es wurde vielmehr vom Namenspatron des ZIB als jugendlicher eigenhändig entworfen und vom Gründer des ZIB erkannt und durchgesetzt.

Konrad Zuse war damals 16 Jahre alt und sein Ziel war, Ingenieur zu werden. Obwohl er einen klaren Berufswunsch hatte, entdeckte er an sich weitere Talente. Das Zeichnen „ging ihm flott von der Hand“ und eine zeitlang „stritt nun der Ingenieur mit dem Künstler“. Die Zeichnungen aus dieser Zeit – vor allem Karikaturen – füllten ganze Mappen. Am Ende siegte der Ingenieur in ihm und er plante, nach dem Abitur in seiner Geburtsstadt Berlin zu studieren.

Nachdem er „Metropolis“ von Fritz Lang im Kino gesehen hatte, war er wie elektrisiert. Die Stadt der Zukunft sollte nicht so verbaut sein wie Berlin. Als Jahresarbeit für die Oberprima fertigte der junge Konrad Zuse einen kühnen Entwurf für „sein Metropolis“: eine 35-Millionen-Stadt, durchgeplant nach verkehrstechnischen Gesichtspunkten.<sup>1</sup>

In den 20er Jahren gab es zwei dominierende Muster der Stadtplanung, zum einen das amerikanische Schachbrettmuster, zum anderen ein rein zentrales System. Konrad Zuse wählte eine Kombination beider Formen, bei der sich das äußere zentrale Straßensystem im Zentrum in ein homogenes System mit Sechssymmetrie auflöst.

Sein genialer Entwurf hat für das ZIB heute vier Bedeutungen:

- ein Straßen- und Verkehrsnetz,
- ein Finite-Elemente-Netz,
- Lese-, Schreib- und Kontrolldraht in einer Zwischenphase der Computerentwicklung (Ferritkern-Wicklung),
- ein meditatives Mandala.

Konrad Zuse ist leuchtendes Beispiel dafür, dass die Verbindung von logischem Denken, Kreativität und strukturiertem Arbeiten zum Erfolg führt, wenn sie gefördert wird. Was lag also näher, als das „Metropolis-Straßensystem“ zum Logo zu erheben.

<sup>1</sup> Konrad Zuse, **Der Computer – Mein Lebenswerk**. Berlin, Heidelberg 1984, S. 10.

## ZUSES WERK WEITERDENKEN

„Zuses Werk weiterdenken“ – dies ist der Leitsatz für die Forscherinnen und Forscher, die am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) tätig sind. Dabei wird dem Weiterdenken breiter Raum eingeräumt: nicht enges Verfolgen der tradierten gedanklichen Linien, sondern Nachfolge im Werk, Übernahme der geistigen Haltung, des Musters, welches Konrad Zuses Arbeit zugrunde lag. In diesem Sinne verstehen wir am Konrad-Zuse-Zentrum Nachfolge als Hineinnehmen der inneren Gestalt Zuse in unser Werk.

Pioniere wie Zuse stoßen ein Tor auf, von dem aus zahlreiche Wege weiterführen – es ist gerade diese Eigenart ihres Werkes, die ihnen historische Bedeutung zukommen lässt. In diesem Zusammenhang ist es auch Mathematikern möglich, Zuse nachzufolgen, der ja selbst stolz war, Ingenieur zu sein. Die Mathematik ist im Werk des Ingenieurs Zuses tief verankert. Man denke nur an seine berühmte Tagebuchnotiz vom 20.6.1937:

*„Die Elementaroption heißt: Vergleich zweier Sekundalziffern auf Gleichheit. Resultat ist zweifach variabel, also ebenfalls eine Sekundalziffer.“*

An diesem Satz würden wir heute lediglich den Ausdruck „Sekundalziffer“ ersetzen durch den Ausdruck „Binärziffer“. Ansonsten steht er wie damals, ein Satz von eherner Größe, ein zutiefst mathematischer Satz des Ingenieurs Konrad Zuse. Dieser Satz eröffnet simultan die Möglichkeiten zu automatisierter numerischer wie symbolischer Rechnung. An ihm lässt sich in nuce erkennen, in welcher souveräner Weise Pioniere die engen akademischen Fächergrenzen sprengen und dadurch neue Bereiche öffnen.

Konrad Zuse war zeitlebens ein Verfechter der Interdisziplinarität, wie wir sie am ZIB pflegen. Er brachte die Mathematik, die manchmal versucht ist, an sich unwichtige Fragen mit höchster technischer Brillanz und Akribie zu klären, und die Ingenieurwissenschaften, die dazu tendieren, rasche Lösungen von Tagesproblemen ohne die notwendige wissenschaftliche Fundierung anzustreben, zusammen. Er ist der Initiator des neuen Dialogs zwischen Mathematikern und Ingenieuren, aus dem echte Innovationen entstehen können.

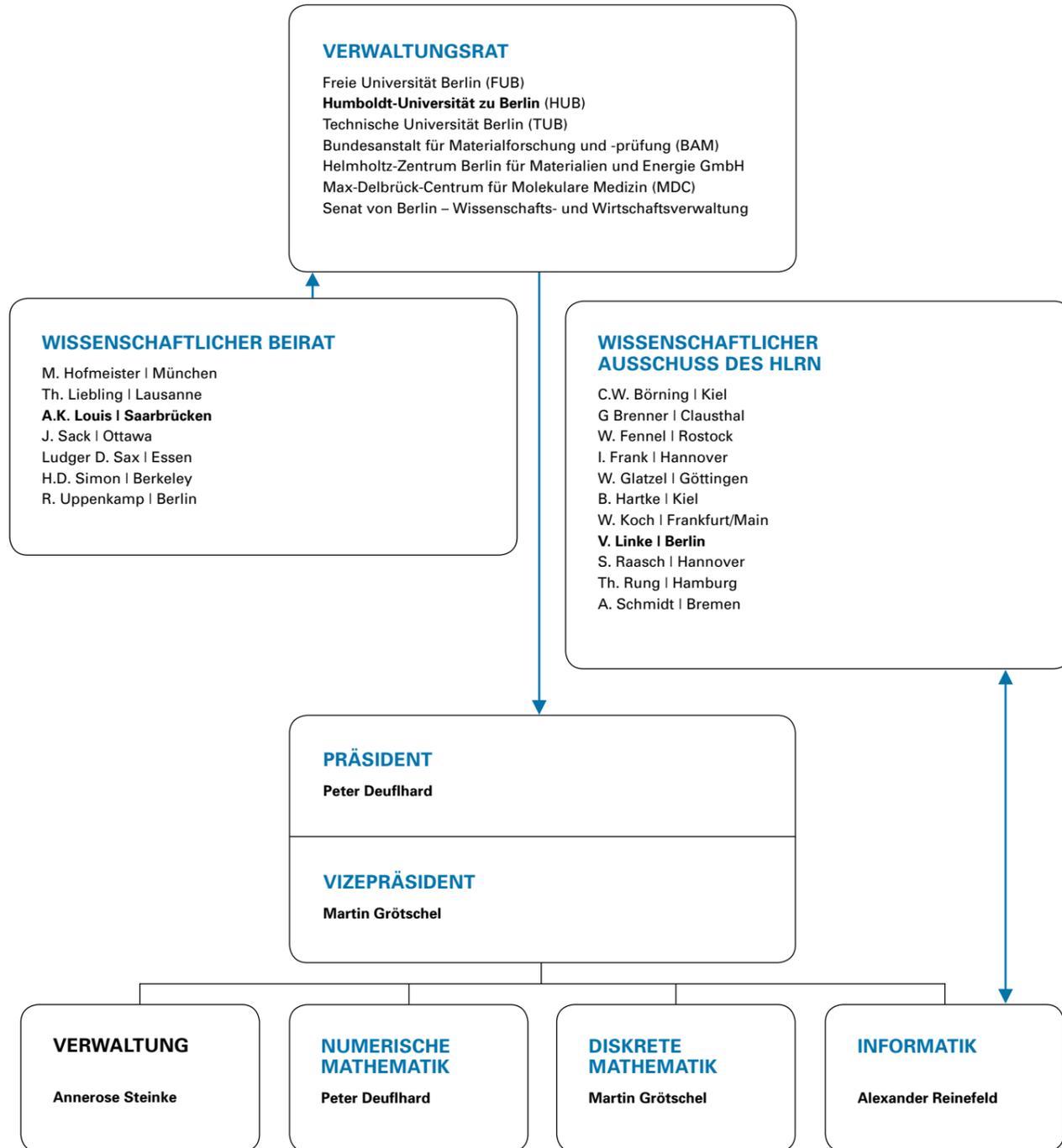
Zuse entwickelte zuerst den Computer, das mechanische Hirn, dann wandte er sich den Programmiersprachen zu. Mit dieser Innovation wandelt sich schließlich auch die Mathematik der Lösungsmethoden. Zuerst in den angelsächsischen Ländern, später auch in Deutschland – der mathematische Gehalt wird nun an praktischer Relevanz gemessen. Es entsteht eine nie gekannte Dynamik: Anwendungsprobleme motivieren die Konstruktion neuer Rechner, neue Rechner erschließen neue Anwendungsprobleme und verändern die mathematischen Lösungsmethoden. Immer komplexere Anwendungsprobleme generieren immer bessere Lösungsmethoden.

Konrad Zuse hat mit seinem Werk einen Stein ins Wasser geworfen, der auch heute noch Wellen wirft. Am ZIB arbeiten exzellente Teams von Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen aus verschiedenen Fachrichtungen an anwendungsorientierten Fragestellungen aus Mathematik und Informatik. Sie lösen gemeinsam Probleme und schaffen Neues – ganz im Sinne von Konrad Zuse.

# DAS ZUSE-INSTITUT-BERLIN

## „SCHNELLE ALGORITHMEN – SCHNELLE RECHNER“

### ORGANISATIONSSTRUKTUR DES ZIB



### STRUKTUR UND ZIELE

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde 1984 durch Gesetz als Anstalt des öffentlichen Rechts als außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin gegründet. Das Zuse-Institut betreibt in enger fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen des Landes Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik und Praktischer Informatik. Zugleich bietet es Hochleistungsrechnerkapazität und langfristige Datenhaltung als die dazugehörige Dienstleistung an.

### FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG

Schwerpunkte der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZIB sind die Gebiete Numerische Mathematik, Diskrete Mathematik und Informatik. Diese Gebiete umfassen:

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

Theorie- und Algorithmenentwicklung, die Erprobung der Algorithmen an leistungsfähigen Computersystemen und der Test der mathematischen Modelle auf ihre praktische Brauchbarkeit gehen dabei eine nachhaltige Synthese ein.

### ANWENDUNGSORIENTIERTE FORSCHUNG UND KOOPERATIONEN

Das ZIB leistet Beiträge zur Lösung drängender Fragen in Wissenschaft, Technik, Umwelt und Gesellschaft, die mit herkömmlichen Methoden nicht gelöst werden können, aber mathematischer Analyse zugänglich sind. Der Anteil des ZIB besteht dabei in der Entwicklung innovativer Algorithmen und dem Einsatz von Hochleistungsrechnern in enger Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft.

Die Finanzierung der Forschungsarbeiten erfolgt im Rahmen der Grundfinanzierung des Landes Berlin und – überwiegend – durch eingeworbene Drittmittel. Neben Kooperationen mit wissenschaftlichen Einrichtungen betreibt das ZIB zurzeit gemeinsame Projekte mit Partnern aus den Bereichen Telekommunikation, Medizintechnik, Biotechnologie, Systembiologie, Öffentlicher Personennahverkehr, Transport und Logistik, Fahrzeugbau, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energieversorgung und Nano-Optik. Das ZIB ist zudem, neben den drei Berliner Universitäten FU, TU und HU sowie dem WIAS, eine der fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse“ tragen.

### SUPERCOMPUTING

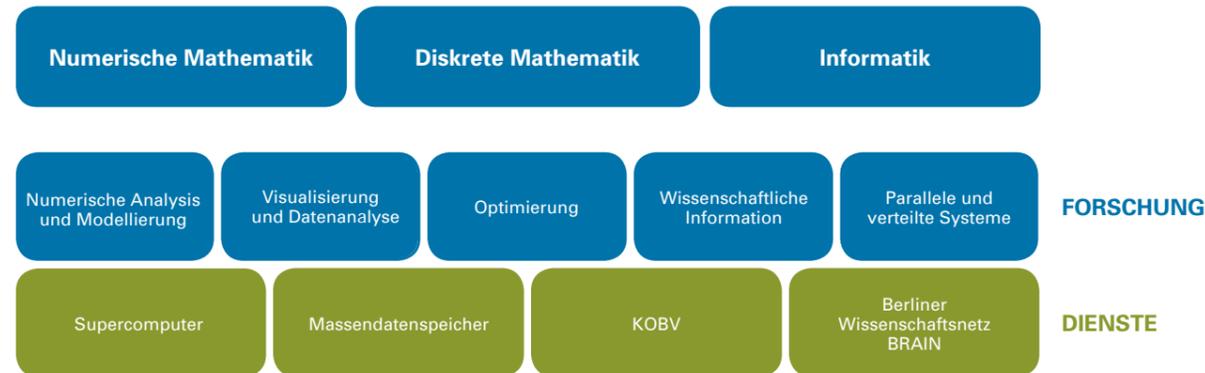
Das ZIB betreibt in Berlin im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) als Dienstleistung für Hochschulen und Wissenschaftliche Einrichtungen in Norddeutschland ein Hochleistungsrechnersystem. Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Die Zuteilung von Rechenzeit an Großprojekte erfolgt nach wissenschaftlichen Kriterien der DFG durch einen vom ZIB unabhängigen Wissenschaftlichen Ausschuss. Alle befürworteten Projekte werden je durch einen Fachberater („HPC-Lotsen“) begleitet.

### LANGFRISTIGE DATENHALTUNG ALS DIENSTLEISTUNG

Im Jahr 2008 sind im ZIB zwei neue Datenrobotersysteme eingeweiht worden. Für den Ausbau der Archivierung wissenschaftlicher Daten erhielt das ZIB im Jahr 2009 Mittel aus dem Konjunkturprogramm II und war somit in der Lage, diesen hochwertigen Service auch über die Grenzen des Instituts Berliner Forschungseinrichtungen anzubieten.

# GLIEDERUNG DER WISSENSCHAFTLICHEN BEREICHE

Im Jahr 2009 wurden die Abteilungen und Arbeitsgruppen der Bereiche entsprechend den aktuellen Forschungsschwerpunkten neu gegliedert wie folgt:



## NUMERISCHE MATHEMATIK

Der Bereich Numerische Mathematik gliedert sich in zwei Abteilungen:

- Numerische Analysis und Modellierung
- Visualisierung und Datenanalyse

Aufgabe der Abteilung Numerische Analysis und Modellierung ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten Numerischen Mathematik mit Schwerpunkt nichtlineare Modelle, insbesondere Differentialgleichungsmodelle. Ziel ist die Konstruktion von effizienten und verlässlichen Algorithmen zur Simulation, Identifikation und Optimierung (inklusive optimaler Steuerung) bei komplexen technologischen Problemen. Dabei sind Fragen der mathematischen Modellierung häufig zwingend mit einzubeziehen. Die Abteilung gliedert sich in die vier Arbeitsgruppen:

- Virtuelle Medizin
- Mathematischer Molekül-Entwurf
- Mathematische Nano-Optik
- Mathematische Systembiologie

Ziel der Forschungsarbeiten in der Abteilung Visualisierung und Datenanalyse ist die Entwicklung neuer, effektiver Verfahren zur Visuellen Datenanalyse. Hierfür werden Algorithmen aus den Bereichen Bild- und Datenanalyse, Geometrieverarbeitung, Computergrafik und Visualisierung entwickelt. Die Abteilung gliedert sich in die vier Arbeitsgruppen:

- Visualisierungsalgorithmen
- Visualisierungssysteme
- Medizinische Planung
- Vergleichende Visualisierung

Die entwickelten Verfahren finden Anwendung in der Molekülphysik, der Neuro- und Pflanzenbiologie, der medizinischen Therapieplanung, der computergestützten Chirurgie, der Geo- und Astrophysik sowie der Strömungsanalyse. Die Abteilung stellt Visualisierungs-Software und -Hardware (z.B. das Studio da Vinci) zur Verfügung und unterstützt Anwender bei der Realisierung komplexer Visualisierungsprojekte.

## DISKRETE MATHEMATIK

Der Bereich Diskrete Mathematik gliedert sich in die Abteilungen:

- Optimierung
- Wissenschaftliche Information

Geforscht wird in der Abteilung Optimierung in den Bereichen algorithmische Diskrete Mathematik sowie lineare und nichtlineare ganzzahlige Optimierung. Ziel ist die mathematische Analyse und, darauf aufbauend, die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren zur Lösung von schwierigen praxisrelevanten Problemen, bei denen diskrete Entscheidungen getroffen werden müssen. Die Abteilung gliedert sich in die drei Arbeitsgruppen:

- Verkehr und Logistik
- Lineare und nichtlineare ganzzahlige Optimierung
- Telekommunikation

Anwendungsschwerpunkte sind die Optimierung von Gas-, Telekommunikations- und Verkehrsnetzen.

Die Abteilung Wissenschaftliche Information beschäftigt sich mit der Konzeption, Entwicklung und Realisierung mathematischer Informationssysteme. Beispielhaft für Internet-basierte Informationstechnologie sind die Projekte „Informationendienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)“ und „Informationstechnische Werkzeuge für Museen“ sowie der „Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)“.

## INFORMATIK

Der Bereich Informatik untergliedert sich in die Abteilungen:

- Parallele und Verteilte Systeme
- Supercomputing und IT-Service

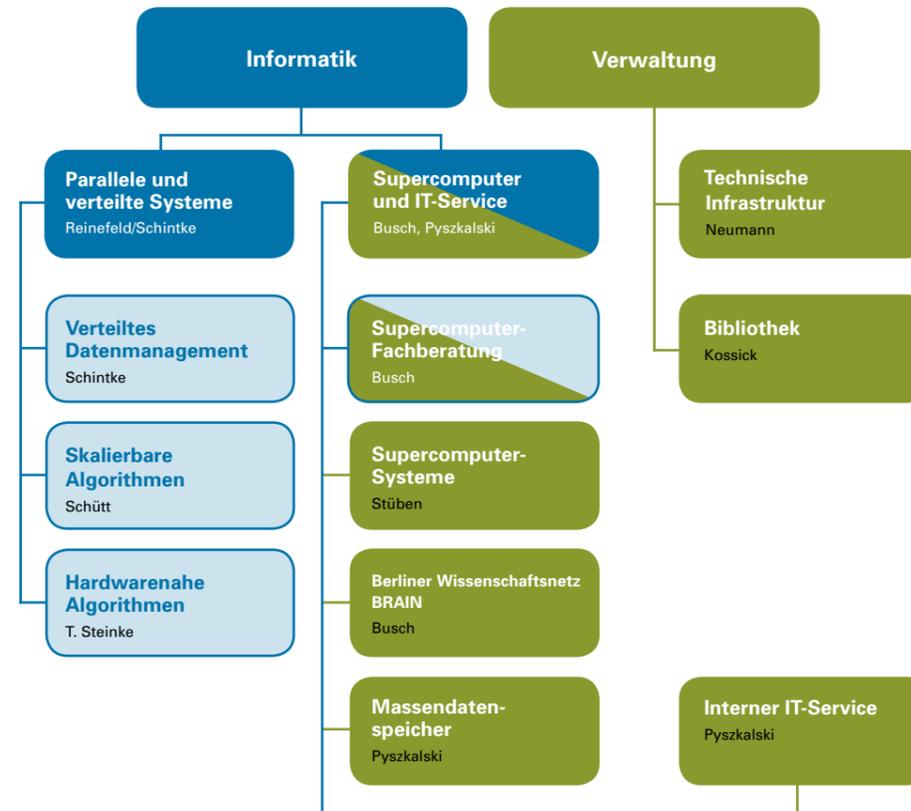
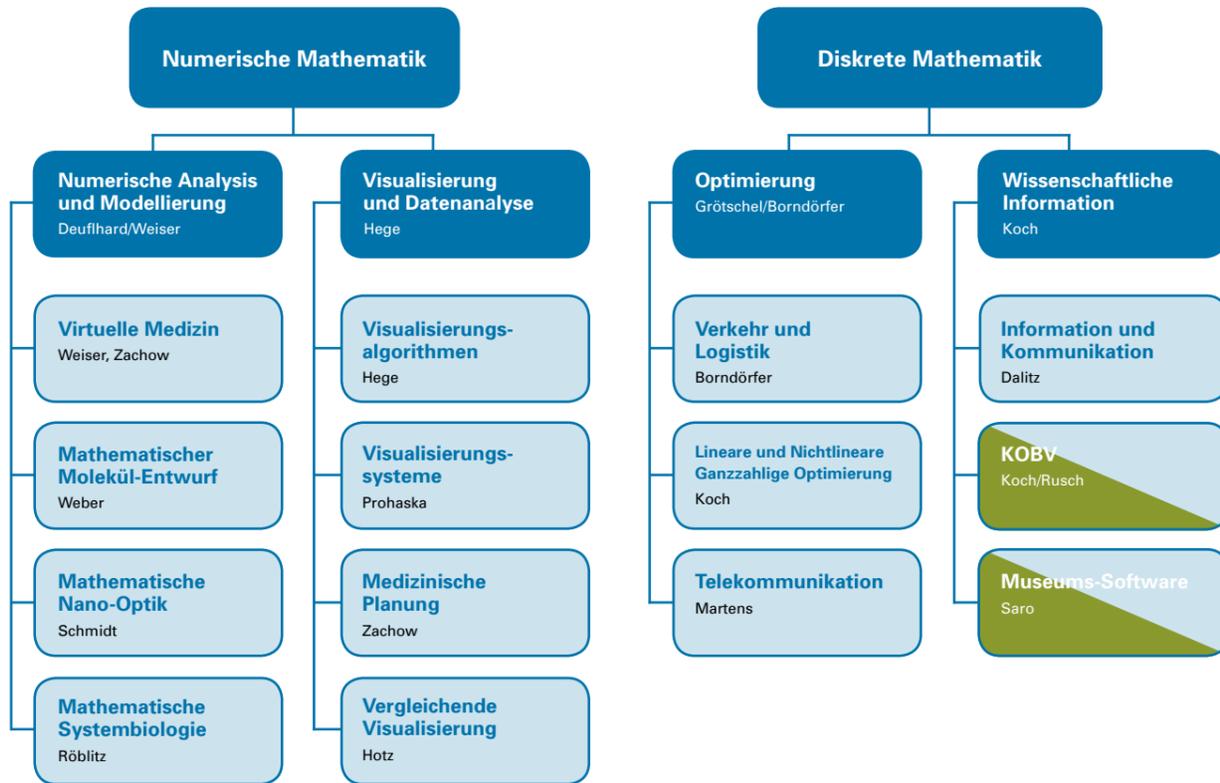
Im Zentrum des Forschungsinteresses liegt die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme. Profitiert wird dabei vom Zugriff auf modernste Hochleistungsrechner und Cluster, die im ZIB als Dienstleistung für die Wissenschaft betrieben werden. Die Erfahrungen aus dem Produktionsbetrieb der Parallelrechner bilden den Hintergrund für die Entwicklung zuverlässiger, skalierbarer Dienste in verteilten Systemen. Zurzeit liegt der Forschungsschwerpunkt der Abteilung im Management sehr großer Datenmengen in Grid-Systemen, einer Problematik, die in unserer vernetzten und mobilen Welt zunehmend an Bedeutung gewinnt.

Zu den Hauptaufgaben der Abteilung Supercomputing und IT-Service gehören Auswahl, Bereitstellung und Betrieb von Hochleistungsrechnerkapazität sowie die fachliche Beratung der Anwender zur effizienten Nutzung der Systeme, insbesondere bei Neuentwicklungen und Anpassungen der Codes an die spezifischen Eigenschaften der im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) betriebenen Systeme. Die Abteilung koordiniert auch das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN und betreut den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN.

Weiterhin werden in der Abteilung hochwertige IT-Services zur Verfügung gestellt. Aufgabe der Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen ist es, die Forschungsarbeiten im ZIB durch Planung, Beschaffung und Wartung der Ausstattung mit Software und Hardware zu unterstützen. Hierzu zählen sämtliche im Haus betriebenen Arbeitsplatzsysteme, Server, Netzkomponenten, Peripheriegeräte sowie Web- und Mail-Services. Ferner berät und betreut die Abteilung die Nutzer der langfristigen Datenhaltung im Haus. Diesen Service stellt das ZIB seit 2009 auch externen wissenschaftlichen Einrichtungen zur Verfügung.

# ORGANISATIONSSTRUKTUR DES ZIB

## ORGANIGRAMM



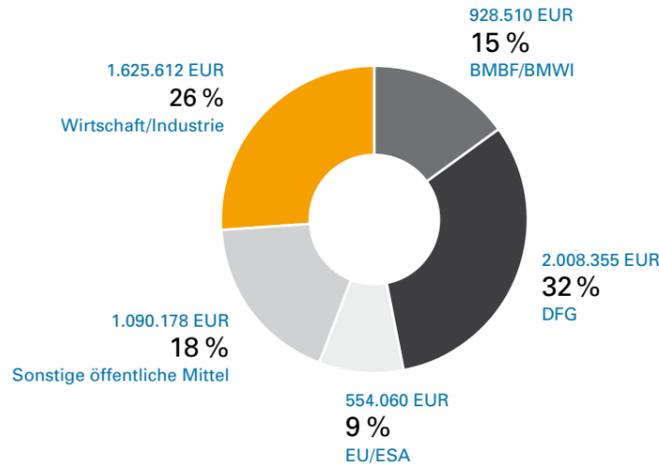
### AM ZIB ARBEITEN FORSCHUNG UND SERVICE ENG ZUSAMMEN.

Im Jahr 2009 wurden die Abteilungen und Arbeitsgruppen der Bereiche entsprechend den aktuellen Forschungsschwerpunkten gegliedert.

- Forschung (Bereiche und Abteilungen)
- Forschung (Arbeitsgruppen)
- Service (Abteilungen und Arbeitsgruppen)

# WIRTSCHAFTLICHE SITUATION

## DRITTMITTELEINNAHMEN ZIB NACH HERKUNFT:



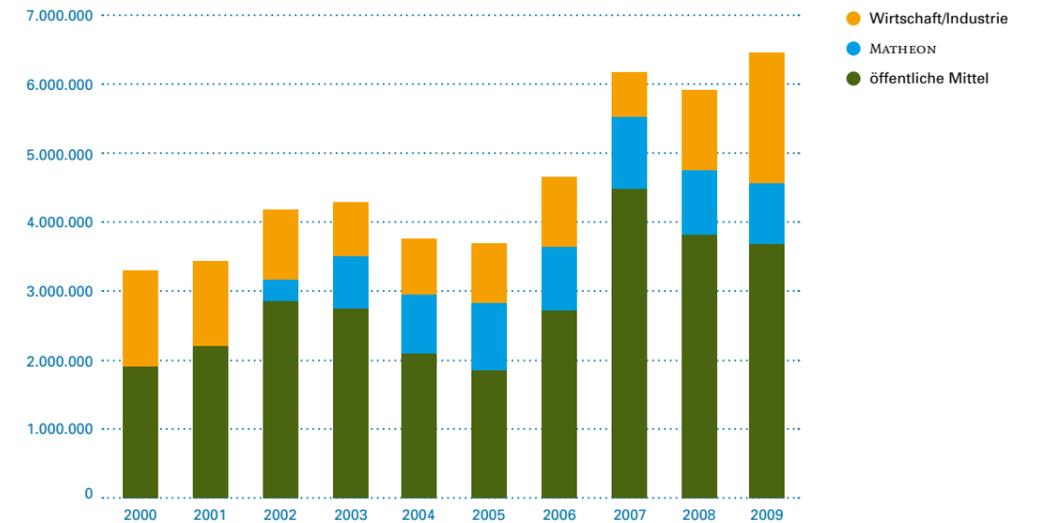
Als Anstalt des öffentlichen Rechts und Institut des Landes Berlin finanziert das ZIB seine wissenschaftliche Arbeit vor allem aus zwei Quellen, zum einen aus der Grundfinanzierung des Landes zum anderen aus eingeworbenen Drittmitteln. Auch im Jahr 2009 setzte sich der Trend fort, dass die Finanzierung des Instituts aus öffentlichen Mitteln zurückgeht und der Anteil der Drittmittel überproportional steigt. Bemerkenswert ist diese Entwicklung vor allem vor dem Hintergrund der allgemeinen Wirtschaftskrise. Die Arbeit der Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen des ZIB wurde im Jahr 2009 zu drei Vierteln aus Drittmitteln finanziert. Die Zahlen belegen, dass das Institut in wachsendem Maße ein gefragter und erfolgreicher Partner für innovative Unternehmen ist.

Aufgrund der schwierigen finanziellen Situation des Landes Berlin wurden auch im Jahre 2009 die Mehraufwendungen des ZIB vor allem im Personalbereich nicht kompensiert. Durch die seit Sommer 2003 geltende Absenkung des BAT und die damit verbundene spürbare Kürzung der Gehälter der Angestellten des Öffentlichen Dienstes hatte das Institut Schwierigkeiten, qualifizierten Nachwuchs zu gewinnen. Dass dies trotzdem gelang, liegt am ausgezeichneten Ruf des ZIB bei jungen Wissenschaftlern, die erkennen, dass das Institut mit seinen anspruchsvollen Projekten ein Sprungbrett sowohl für eine Karriere im wissenschaftlichen Bereich als auch in der Wirtschaft bietet. In das Gesamtbild passt dennoch, dass das ZIB 2009 im Vergleich mit dem Wirtschaftsjahr 2008 im Schnitt mit weniger Personal eine höhere Anzahl von Projekten bearbeitet hat.

In 2009 konnte der HLRN-II nahezu vollständig installiert werden. Eine noch fehlende Komponente wird den Rechner in 2010 komplettieren. Für den Ausbau der Archivierung wissenschaftlicher Daten erhielt das ZIB im Jahr 2009 Mittel aus dem Konjunkturprogramm II; diesen hochwertigen Service kann das Institut deshalb nun auch externen Berliner Forschungseinrichtungen anbieten.

Das Land Berlin leistete 2009 einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss in Höhe von 7.074 T EUR (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile), der investive Bereich des ZIB wurde mit 435 T EUR unterstützt. Die Drittmittelinnahmen sind von 5.90 Mio. EUR in 2008 auf 6.47 Mio. EUR in 2009 gestiegen. Innerhalb der eingeworbenen Drittmittel stiegen die Mittel aus Industrieprojekten von 1.130 T EUR in 2008 auf 1.893 T EUR in 2009. Der Anteil der öffentlich geförderten Drittmittel sank von 4.776 T EUR in 2008 auf 4.584 T EUR in 2009. Die Drittmittelinnahmen lagen damit auf dem höchsten Stand seit Gründung des ZIB.

## DRITTMITTELEINNAHMEN IN EUR:



# PERSONELLE ENTWICKLUNG

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter in Höhe von 80,5 Stellen sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die deutlich über dem Durchschnitt liegende Altersstruktur im Bereich der unbefristet beschäftigten Belegschaft besteht im Personalhaushalt eine besondere finanzielle Belastung, die auch 2009 durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmittelinnahmen abgedeckt werden musste. Die erhebliche Steigerung der vom Arbeitgeber aufzubringenden Umlage für das VBL-Sanierungsgeld und der dadurch entstandenen Mehrbelastung des ZIB-Haushalts ist nur teilweise durch eine moderate Erhöhung des Landeszuschusses ab 2008 ausgeglichen worden.

## ZAHL DER BESCHÄFTIGTEN IM JAHR 2009 IM VERGLEICH ZUM VORJAHR:

	01.01.09 davon			01.01.10 davon		
	gesamt	unbefristet	befristet	gesamt	unbefristet	befristet
Leitung	4	4	0	4	4	0
Wissenschaftler	93	17	76	95	19	76
Service-Personal	46	44	2	40	36	4
KOBV-Zentrale	17	7	10	14	7	7
Studenten/Auszubildene	57	0	57	53	0	53
<b>Total</b>	<b>217</b>	<b>72</b>	<b>145</b>	<b>206</b>	<b>66</b>	<b>140</b>

# ORGANISATION

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984 gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuss des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

## ORGANE

Organe des ZIB sind der Präsident und der Verwaltungsrat.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.  
Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel.

Der Verwaltungsrat setzte sich 2009 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Michael W. Linscheid, HUB Vorsitzender
- Prof. Dr. Johann Köppel, TUB, stellvertretender Vorsitzender
- Prof. Dr. Jochen Schiller, FUB
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Frauen
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Anke Pyzalla, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (HMI)
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 13. Februar und am 09. Juli 2009.

## SATZUNG

Die vom Verwaltungsrat in seiner Sitzung am 30.06.2005 beschlossene Satzung legt Funktion und Verfahrensweise der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung sowie die Dienstleistungsfunktionen und regelt die Zusammensetzung und Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirats.

## WISSENSCHAFTLICHER BEIRAT

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirats ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie. Der Verwaltungsrat hat als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirats bestellt:

- Prof. Dr. Alfred Louis, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Sprecher des Beirats
- Prof. Dr. Michael Hofmeister, Siemens AG, München
- Prof. Dr. Thomas Liebling, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne-Ecublens, Schweiz
- Prof. Dr. Jörg-Rüdiger Sack, Carleton University, Ottawa, Kanada
- Dipl.-Math. Ludger D. Sax, E.ON Gastransport GmbH, Essen
- Dr. Horst D. Simon, NERSC, Lawrence Berkley, National Laboratory Berkley, USA
- Dr. Reinhard Uppenkamp, Berlin Chemie AG, Berlin

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 29. und 30. Juni 2009 im ZIB.

## MITGLIEDSCHAFTEN

Das ZIB ist Mitglied in folgenden Organisationen:

- DFN – Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V.
- DMV – Deutsche Mathematiker-Vereinigung
- ECMI – European Consortium for Mathematics in Industry
- FAV – Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
- Forum für Zukunftsenergien e.V.
- DW – Informationsdienst Wissenschaft e.V.
- Konrad-Zuse-Gesellschaft e.V.
- NAG Users Association
- OpTecBB – Optische Technologien aus Berlin und Brandenburg
- PlanatLAB
- SIAM – Society for Industrial and Applied Mathematics
- ZKI – Zentrum für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.
- Zuse-Park e.V.

## ZIB-FELLOWS

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2009 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

### SENIOR-FELLOWSHIP

Prof. Dr. Dietrich Braess (Ruhr-Universität Bochum)  
Nichtlineare Mechanik und Locking-Phänomene

Prof. Dr. Herbert W. Franke  
„Math goes Art“

### JUNIOR-FELLOWSHIP

Prof. Dr. rer.nat. Reinhard Hochmuth (Universität Kassel)  
Mathematische Multiskalen-Modellierung in der Neurobiologie

Dr. Arie M.C.A. Koster (RWTH Aachen)  
Diskrete Optimierung für Multi-Layer Telekommunikationsnetze

Prof. Dr. Sven O. Krumke (TU Kaiserslautern)  
Online-Disposition von Einsatzfahrzeugen

Prof. Dr. Marc Pfetsch (TU Braunschweig)  
Nichtlineare Ganzzahlige Optimierung

Prof. Dr. Marc Steinbach (Leibniz Universität Hannover)  
Optimierung in Energie- und Versorgungswirtschaft

Prof. Dr. Gerd Teschke (Hochschule Neubrandenburg)  
Inverse Probleme und Signal Analyse in der Meteorologie

Prof. Dr. Max Wardetzky (Universität Göttingen)  
Geometrische Variationsmethoden in der Flächenbearbeitung

Prof. Dr. Thomas Wolf (Brock University, Ontario, Canada)  
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen;  
symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie

---

#### SELBSTVERWALTUNG

Der Personalrat des ZIB setzt sich wie folgt zusammen:

- Wolfgang Dalitz (Vorsitzender)
- Marlies Engelke
- Bodo Erdmann
- Dirk Krickel
- Marika Neumann
- Uwe Pöhle
- Dr. Stefan Zachow

Uta Kaminsky (Frauenvertreterin)

---

## SPIN-OFF-FIRMEN

MITARBEITERINNEN UND MITARBEITER DES ZIB HABEN BISHER DIE FOLGENDEN FIRMEN AUSGEGRÜNDET:

#### Computing in Technology GmbH (CIT) | 1992

Modellierung und Entwicklung von numerischer Software für die technische Chemie  
[www.cit-wulkow.de](http://www.cit-wulkow.de)

---

#### RISK-CONSULTING Prof. Dr. Weyer GmbH | 1994

Database Marketing für Versicherungen  
[www.risk-consulting.de](http://www.risk-consulting.de)

---

#### Intranetz GmbH | 1996

Softwareentwicklung für Logistik, Database Publishing, eGovernment  
[www.intranetz.de](http://www.intranetz.de)

---

#### AktuarData GmbH | 1998

Entwicklung und Vertrieb von Risikobewertungssystemen zur Krankenversicherung  
[www.aktuadata.de](http://www.aktuadata.de)

---

#### Visage Imaging GmbH (hervorgegangen aus dem Spin-Off Indeed-Visual Concepts GmbH) | 1999

Visualisierung und Datenanalyse (Amira etc.), Medizinische Visualisierung (RIS=Radiology Information System, PACS=Picture Archiving and Communication System), Virtual Reality System Integration (früher)  
[www.visageimaging.com](http://www.visageimaging.com)

---

#### atesio GmbH | 2000

Entwicklung von Software und Dienstleistungen für die Planung, Konfiguration und Optimierung von Telekommunikationsnetzen  
[www.atesio.de](http://www.atesio.de)

---

#### bit-side GmbH | 2000

Mobiltelefon-Anwendungen, Visualisierung  
[www.bit-side.com](http://www.bit-side.com)

---

#### JCMwave GmbH | 2005

Simulationssoftware für optische Komponenten  
[www.jcmwave.com](http://www.jcmwave.com)

---

#### Lenné3D GmbH | 2005

3D-Landschaftsvisualisierung, Softwareentwicklung und Dienstleistungen  
[www.lenne3d.com](http://www.lenne3d.com)

---

#### onScale Solutions GmbH | 2006

Softwareentwicklung, Beratung und Dienstleistungen für parallele und verteilte Speicher- und Rechnersysteme  
[www.onscale.de](http://www.onscale.de)

---

#### molConcept GmbH | 2008

Mathematische Konzepte für molekulares Design, Softwareentwicklungen für den computergestützten Wirkstoffentwurf  
[www.molconcept.com](http://www.molconcept.com)

---

#### Laubwerk – Digital Botany | 2009

Erstellung von digitalen Pflanzenmodellen  
[www.laubwerk.com](http://www.laubwerk.com)

---

**ABTEILUNG**

**» NUMERISCHE ANALYSIS  
UND MODELLIERUNG**

VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE  
OPTIMIERUNG

WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION  
PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE

# NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

LEITUNG: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard, Dr. Martin Weiser

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Numerik](http://www.zib.de/Numerik)

## MISSION

Die *Effizienz numerischer Algorithmen* spielt in vielen Problemen der Natur- und Ingenieurwissenschaften eine Schlüsselrolle. Allerdings gilt: Je intensiver Numeriker mit Vertretern der Anwendungsdisziplinen kooperieren, desto wichtiger werden auch Fragen der mathematischen Modellierung. Diesem Zusammenhang trägt der Name der Abteilung Rechnung. Dabei bezeichnet „Numerische Analysis“ schwerpunktmäßig die theoretische Herleitung und Analyse von Algorithmen, während „Modellierung“ die mathematische Problemformulierung wie die numerische Simulation (oft auch „numerische Modellierung“ genannt) im Anwendungskontext umfasst. Im letzten Punkt kooperiert die Abteilung eng mit der Abteilung „Visualisierung und Datenanalyse“.

## STRUKTUR

Die Abteilung gliedert sich derzeit in die vier Arbeitsgruppen:

- **Virtuelle Medizin** (Ltg. Dr. Martin Weiser)
- **Mathematischer Molekül-Entwurf** (Ltg. Dr. Marcus Weber)
- **Mathematische Nano-Optik** (Ltg. PD Dr. Frank Schmidt)
- **Mathematische Systembiologie** (Ltg. Dr. Susanna Röblitz)

## SPIN-OFFS

Sowie im Zuge einer Kooperation die Resultate unserer Forschung „reif“ sind für einen Übergang in den kommerziellen Bereich, denken wir an die Ausgründung einer Firma. Von den im Web aufgeführten Firmen<sup>1</sup> sind fünf aus der Abteilung entstanden, die erste bereits 1992, die bisher letzte 2008.

## AUSZEICHNUNGEN UND RUF

Peter Deuffhard wurde 2009 als SIAM Fellow ausgezeichnet. Achim Schädle hat einen W2-Ruf an die Universität Düsseldorf angenommen.

## VIRTUELLE MEDIZIN

Diese AG kooperiert sehr eng mit der AG „Medizinische Planung“. Mathematisches Fundament sind die am ZIB seit Jahren theoretisch vorangetriebenen und bis zu einer gewissen algorithmischen Reife entwickelten funktionsraumbasierten adaptiven Mehrgittermethoden für partielle Differentialgleichungen. Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt auf zustands- und steuerungsbeschränkter Optimierung. Hier gibt es einen natürlichen Gesprächsfaden mit der Abteilung OPTIMIERUNG im Bereich DISKRETE MATHEMATIK. Die Planung in der Krebstherapie Hyperthermie (Kooperation Wust, Charité) wurde im Rahmen von MATHEON und eines DFG-Einzelprojektes bearbeitet. Die entwickelten Algorithmen erlauben mittlerweile eine mathematisch zuverlässige Optimierung der nichtkonvexen, zustands- und steuerungsbeschränkten Probleme. Die dabei gewonnenen Erfahrungen fanden auch Eingang in Identifizierungsprobleme der zerstörungsfreien Prüfung mittels Thermographie (Koop. BAM<sup>2</sup>). Zur effizienten Speicherung großer Zustandstrajektorien wurden neue adaptive Kompressionstechniken entwickelt. Für diese Projekte wurde der bewährte FE-Code **Kardos** eingesetzt sowie die neu entwickelte, auf **Dune** aufsetzende FE-Bibliothek **Kaskade 7**. Die für eine Frakturheilung wichtige Simulation des menschlichen Gangs (Koop. AG Kornhuber, FU Mathematik) wurde im SFB 760<sup>3</sup> sowie im Rahmen von MATHEON bearbeitet. Die Anwendungsproblematik führte dabei auf mathematisch äußerst subtile Fragestellungen bei dynamischen Kontaktproblemen, die 2009

in wichtigen Aspekten erfolgreich angegangen werden konnten. Mathematik hat sich hierbei als Stolperstein für Entwicklungen in der virtuellen Unfallchirurgie erwiesen.

## MATHEMATISCHER MOLEKÜL-ENTWURF

Mathematische Ausgangsbasis dieser AG ist die Ende der 90er Jahre am ZIB erfundene Konformationsdynamik (Deuffhard/Schütte). Ziel der AG war seitdem die algorithmische Beschleunigung hin zu realistischen Anwendungen im Bereich der Chemie und Pharmazie. Im Rahmen von MATHEON wurde 2009 der ursprünglich von Schütte stammende Transferoperator für Markovprozesse durch einen maßgeschneiderten Generator ersetzt; dadurch sind nun wirkliche Probleme des Molekül-Entwurfs in Reichweite unserer Methoden gekommen. Mit unserer Software **ZIBgridfree** wurde 2009 ein erstes Medikament am Rechner konzipiert, das sich inzwischen in der Patentierungsphase befindet (Koop. Ch. Stein, Charité, Anästhesiologie). Innerhalb des SFB 765<sup>4</sup> konnten wir durch Anpassung unserer Methodik an die chemische Fragestellung eine neue Methode zur Bestimmung von Entropieunterschieden vorschlagen. Im Berichtszeitraum wurden eine Reihe technologisch relevanter Projekte mit der BAM durchgeführt. Bereits 2008 wurde die Firma **MOLCONCEPT** als Spin-Off des ZIB ausgegründet.

## MATHEMATISCHE NANO-OPTIK

Diese AG ist aus dem mathematischen Fundament der „Pol-Bedingung“ gewachsen, die am ZIB erfunden und theoretisch wie algorithmisch äußerst erfolgreich vorangetrieben worden ist. Sie bildet ein Dachkonzept für sehr allgemeine Streuprobleme in unbeschränkten Gebieten, z. B. auch für die oft verwendete PML-Methode, die auf dieser Basis signifikant verbessert

werden konnte (Dissertation L. Zschiedrich). Bereits 2002 wurde die Spin-Off Firma **JCM-WAVE** (JCM für James Clerk Maxwell) aus der Abteilung ausgegründet. Funktionenraumbasierte adaptive Mehrgittermethoden für die Maxwell-Gleichungen führten zum Aufbau des in internationalen Benchmarks führenden Softwaresystems **JCMsuite**. Im Rahmen von MATHEON werden FEM für nanooptische Probleme untersucht, z. B. nanophotonische Metamaterialien und Resonatoren in Koop. mit dem CFN Karlsruhe,<sup>5</sup> Dünnschicht-Solarzellen in Koop. mit PVComB Berlin,<sup>6</sup> VCSEL-Strukturen im SFB 787<sup>7</sup> oder nichtlineare plasmonische Phänomene an Metall-Luft-Grenzschichten im DFG-SPP 1391<sup>8</sup> (Koop. AG Knorr, TU Berlin, Nichtlineare Optik und Quantenelektronik). In einem von IBB und EU gemeinsam geförderten Projekt *Schnelle Online-Simulation* werden Algorithmen entwickelt, die komplexe, parametrisierte 3D-Probleme im Sekundentakt lösen.

## MATHEMATISCHE SYSTEMBIOLOGIE

Diese Arbeitsgruppe ist Ende 2009 entstanden als ZIB-interne Ausgründung auf der Basis von Vorarbeiten einerseits zur effizienten numerischen Lösung der chemischen Mastergleichung (AG „Mathematischer Molekül-Entwurf“) und andererseits zur mathematischen Modellierung des (menschlichen) weiblichen Zyklus (Software **GynCycle**). Unsere ersten Arbeiten haben bereits zu einer substantiellen Förderung durch internationale Pharma-Firmen geführt. Eine gewiss ungewöhnliche Modifikation unserer Modellierung führte zu einem Kooperationsprojekt über Milchkühe – so etwas gibt es nur in der Mathematik! Innerhalb von MATHEON konnte für die nächste Antragsphase ein neues Projekt eingeworben werden.

<sup>1</sup> [www.zib.de/General/Adm/spinoff/index.en.html](http://www.zib.de/General/Adm/spinoff/index.en.html) <sup>2</sup> Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin <sup>3</sup> SFB 760: Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration

<sup>4</sup> SFB 765: Multivalenz als Organisations- und Wirkprinzip <sup>5</sup> DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen <sup>6</sup> Kompetenzzentrum Dünnschicht- und Nanotechnologie für Photovoltaik Berlin <sup>7</sup> SFB 787: Halbleiter-Nanophotonik <sup>8</sup> SPP 1391: Ultrafast Nanooptics

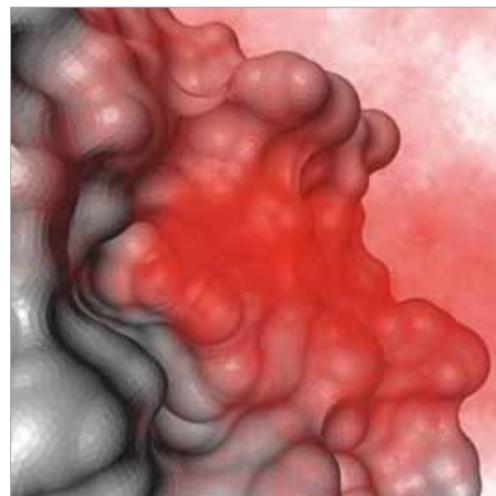
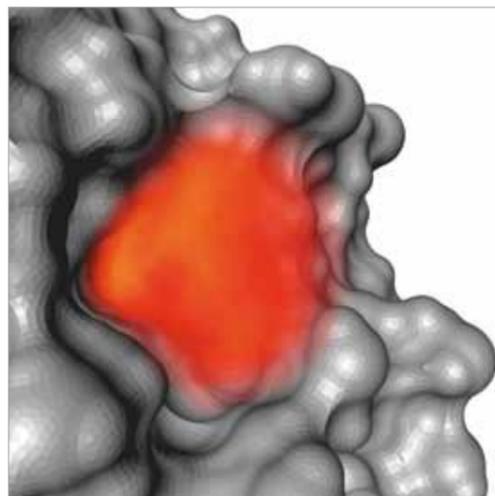
## EINE NEUE SICHT DER KONFORMATIONSDYNAMIK

**BEARBEITET VON:** Marcus Weber, Alexander Bujotzek, Martina Klimm, Vedat Durmaz, Olga Scharnoi, Karsten Andrae, Ole Schütt, Peter Deuffhard

**KOOPERATIONEN:** Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) und Anästhesiologie der Charité Berlin

**FÖRDERUNG:** BAM, DFG-Forschungszentrum MATHEON (Projekt A4) und SFB-765 „Multivalenz“ (Projekt C2)

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/Numerik/projects/compDrugDesign](http://www.zib.de/Numerik/projects/compDrugDesign)



Zwei Bindungsstudien unterschiedlicher Wirkstoffkandidaten an das sogenannte Fab-Fragment des Anti-Morphin Antikörpers (PDB: 9B1). Eine lokalisierte Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte indiziert einen guten Bindungspartner für den Antikörper.<sup>7</sup>

Seit 1998 wurde am ZIB in Kooperation mit der FU Berlin die Konformationsdynamik entwickelt. Mit dieser Methode ist es möglich, die dynamischen Vorgänge eines Molekülsystems als Markovschen Sprungprozess zwischen metastabilen Konformationen zu beschreiben. Metastabile Konformationen sind geometrische Ausprägungen des Molekülsystems, die unter der betrachteten Dynamik lange bestehen bleiben, bevor das System eine andere geometrische Form annimmt. In der Konformationsdynamik bestimmt man die Sprung- und die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Systems in den metastabilen Konformationen. In der Vergangenheit wurde in der Arbeitsgruppe bereits beschrieben, wie sich geringe Sprungwahrscheinlichkeiten zwischen den Konformationen auf die Kondition der Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten auswirken. Es wurde festgestellt, dass sich die relevanten Größen der Konformationsdynamik nicht effizient aus moleküldynamischen Langzeitsimulationen bestimmen lassen.<sup>6,9,10</sup> Bereits

in den Vorjahren wurde daher ein adaptives und hierarchisches Verfahren entwickelt, das nicht auf Langzeitsimulationen basiert, sondern viele gutkonditionierte Kurzzeitsimulationen zu einem Gesamtbild zusammenfasst. Im Berichtszeitraum ist es uns mit diesem Verfahren gelungen, eine wichtige mathematische Besonderheit der Konformationsdynamik zu beweisen.<sup>6</sup> Diese ergibt sich im Zusammenhang mit der Identifikation der metastabilen Konformationen über die am ZIB entwickelte Robuste Perron Cluster Analyse (PCCA+). Wurde bisher angenommen, dass sich Konformationsdynamik als Markovkette darstellen lässt, die zufällig zwischen verschiedenen metastabilen Konformationen springt, hat sich gezeigt, dass eine mengenbasierte Zerlegung des Konformationsraumes die Markov-Eigenschaft der zugrunde liegenden Dynamik stört. Der Grund liegt darin, dass eine Zerlegung des Konformationsraumes aus mathematischer Sicht eine Projektion auf einen niedrigdimensionalen Raum darstellt. Die Dynamik einer Aufenthalts-

**VERÖFFENTLICHUNGEN IN JOURNALEN:** <sup>1</sup> R. Köppen, R. Becker, M. Weber, V. Durmaz, I. Nehls: **HBCD stereoisomers: Thermal interconversion and enantiospecific trace analysis in biota**, *Organohalogen Compounds* 70: 910–913, 2008. <sup>2</sup> A. Bujotzek, M. Weber: **Efficient Simulation of Ligand-Receptor Binding Processes Using the Conformation Dynamics Approach**, *Journal of Bioinformatics and Computational Biology* 7(5): 811–831, 2009. <sup>3</sup> M. Weber: **Spurenstoffe im Trinkwasser - Risikoqualifizierung im Rechner?** In: Schriftenreihe des Vereins für Wasser-, Boden- und Lufthygiene e.V. 134 (CD-ROM), L. Dunemann and O. Schmoll (eds.), 2009. <sup>4</sup> D. Siegel, K. Andrae, M. Proske, C. Kochan, M. Koch, M. Weber, I. Nehls: **Dynamic covalent hydrazine chemistry as a specific extraction and cleanup technique for the quantification of the Fusarium mycotoxin zearalenone in edible oils** (akzeptiert).



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Um Moleküle mit spezifischen Wirkungen entwerfen zu können, müssen große Molekülsysteme im Computer simuliert werden. Selbst informationstechnisch optimierte Verfahren benötigen hierzu noch Rechenzeiten, die nur auf den größten weltweit verfügbaren Supercomputern bewältigt werden könnten. Das ZIB hat einen mathematischen Ansatz entwickelt, der das Simulationsproblem für handelsübliche Rechner lösbar macht.

wahrscheinlichkeitsdichte in einem kontinuierlichen Raum wird auf eine endlichdimensionale Dynamik zurückgeführt. Eine Projektion, die die Markov-Eigenschaft erhält, muss einen endlichdimensionalen, invarianten Unterraum des kontinuierlichen Problems bewahren. Nur die PCCA+ ist in der Lage, eine entsprechende Projektion zu liefern. PCCA+ basiert dabei nicht auf Teilmengen des Konformationsraumes, sondern stellt einen funktionenbasierten Ansatz dar. Mit der neuen Mathematik erhoffen wir uns, in Zukunft noch effizientere Algorithmen zu formulieren. Im Berichtszeitraum wurde die Konformationsdynamik bereits erfolgreich auf große molekulare Systeme ausgedehnt.<sup>2</sup> In Zusammenarbeit mit Teilprojekten aus dem SFB 765 trugen wir mit unseren Simulationsmethoden zu dem Design von verbrückten Wirkstoffmolekülen bei, die erfolgreich zur Hemmung des Östrogenrezeptors verwendet werden. Weiterhin war es uns möglich, einen neuen Wirkstoffkandidaten für die Behandlung von Entzündungsschmerzen zu entwerfen, der im Berichtszeitraum erfolgreich in Tierversuchen getestet wurde und eine selektive Wirkung in entzündetem Gewebe aufweist.<sup>7</sup> Die gutkonditionierte Berechnung von Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten war hier eine wichtige Anforderung. In der Abbildung links ist eine entsprechende Analyse von zwei verschiedenen Schmerzmittelkandidaten an ein vorgegebenes Target dargestellt. Konzentriert sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Kandidaten bei der Simulation auf die Bindungsstelle, dann ist die Bindungsaffinität des Wirkstoffkandidaten erwartungsgemäß groß. Ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des vorgeschlagenen Wirkstoffmoleküls jedoch nicht auf die beabsichtigte Bindungsstelle konzentriert, so lässt sich im Experiment auch keine ausreichende Bindung erhoffen. Ähnliche

Bindungsstudien wurden in Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung auch für Abbauprodukte des Flammschutzmittels HBCD an den humanen Transthyretin-Rezeptor (hTTR) durchgeführt.<sup>1,5,8</sup> Diese Bindungsstudien lassen sich dazu verwenden, um über das toxische Potential chemischer Strukturen Aussagen zu treffen.<sup>3</sup> Bindet nämlich ein Molekül an einen humanen Hormonrezeptor besser als der natürliche Ligand, so kann dieser Stoff den Hormonhaushalt des Menschen stören und ein toxisches Potential entwickeln. Aufgrund der erfolgreichen Zusammenarbeit mit der Bundesanstalt für Materialforschung (BAM) auf diesem Gebiet konnten wir für die BAM mit unseren Simulationsansätzen weitere Kurzzeitprojekte im Bereich des Moleküldesigns ausführen, die bereits nach kürzester Zeit zu einer erfolgreichen Veröffentlichung in einem Journal der analytischen Chemie führten.<sup>4</sup>

**SONSTIGE VERÖFFENTLICHUNGEN:** <sup>5</sup> M. Weber, V. Durmaz, R. Becker: **Predictive Identification of Pentabromocyclododecane (PBCD) Isomers with high Binding Affinity to hTTR** (eingereicht zur Veröffentlichung). <sup>6</sup> M. Weber: **A Subspace Approach to Molecular Markov State Models via an Infinitesimal Generator**. ZIB-Report ZR-09-38, 2009. <sup>7</sup> O. Scharnoi: **Conformation Dynamics Design of Pain Relief Drugs**, Masterarbeit, FU Berlin, Bioinformatik, 2009. <sup>8</sup> V. Durmaz: **Theoretical Investigations on HBCD and PBCD: Interconversion Rates and Receptor Binding Processes**, Masterarbeit, FU Berlin, Bioinformatik, 2009. **VORTRÄGE:** <sup>9</sup> M. Weber: **Recent Progress in Conformation Dynamics**, IMA workshop Chemical Dynamics, Minneapolis, USA, Januar 2009. <sup>10</sup> M. Weber: **Adaptive Methods in Conformation Dynamics II**, Molecular Kinetics 2009, Berlin, Mai 2009.

# KREBSTHERAPIE – REGIONALE HYPERTHERMIE

**BEARBEITET VON:** Martin Weiser, Anton Schiela, Peter Deuflhard, Maximilian Ranneberg

**KOOPERATION:** P. Wust, J. Gellermann (Charité)

**FÖRDERUNG:** DFG Forschungszentrum MATHEON (Projekt A1), DFG Einzelprojekt WU 235/3-1

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A1](http://www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A1) und [www.zib.de/Numerik/projects/Hyper-OC](http://www.zib.de/Numerik/projects/Hyper-OC)



Durch die adaptive Innere-Punkte-Methode berechnete Temperaturverteilungen für unterschiedliche Homotopieparameter.

Das Ziel der Therapieplanung in der regionalen Hyperthermie ist die Bestimmung von Amplituden und Phasen  $u \in \mathbb{C}^n$  für die einzelnen Antennen eines Ringapplikators, so dass eine maximale Tumortemperatur erzielt wird. Dabei darf die Temperatur in gesundem Gewebe nicht zu hoch werden. Die Temperaturverteilung wird durch die Bio-Wärmeleitungsgleichung

$$-\operatorname{div}(\kappa \nabla T) + c_b w(T)(T - T_b) = \frac{\sigma}{2} |Vu|^2$$

beschrieben, so dass die Therapieplanung auf ein PDE-beschränktes Optimalsteuerungsproblem führt. Mathematische Herausforderungen sind die punktwisen Zustandsbeschränkungen  $T \leq T_{\text{lim}}$  im gesunden Gewebe sowie die Nichtkonvexität des Problems, die durch den nichtlinearen Zusammenhang zwischen Steuerungsparametern und Temperaturverteilung hervorgerufen wird.

## NICHTLINEARE PROGRAMMIERUNG

Zur Lösung dieses Optimalsteuerungsproblems wurde ein Optimierungsverfahren entwickelt, das einerseits speziell auf die PDE-Struktur angepasst ist, andererseits Ideen aus der nichtkonvexen Optimierung verwenden

und verfeinert. Zur Behandlung der Zustandsbeschränkungen wurde in den letzten Jahren eine funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methode entwickelt, die zunächst als lokale Methode konzipiert war.<sup>1,2</sup> Diese wurde nunmehr ergänzt durch eine Globalisierungsstrategie, welche als Composite-Step SQP-Methode bezeichnet werden kann. Der Optimierungsschritt wird hier zusammengesetzt aus einem „Normalenschritt“, der den Fehler in den Nebenbedingungen reduzieren soll, und einem „Tangentialschritt“ zur Reduktion des Zielfunktions. Beide Schritte werden aufgrund eines linear beschränkten quadratischen Modells berechnet und jeweils mit Dämpfungsfaktoren versehen. Dabei orientiert sich die Bestimmung des Normalenschrittes an *affin-kovarianten Newton-Verfahren für unterbestimmte Gleichungssysteme*,<sup>3</sup> während der Tangentialschritt nach der Idee der *kubischen oberen Schranke*<sup>4</sup> konstruiert wird. In der Nähe der Lösung kombinieren sich die beiden Schritte zu einem Newton-Schritt, so dass die Methode lokal schnell konvergiert. Dieses Verfahren wurde in **Kaskade 7**<sup>5</sup> implementiert, versehen mit effizienter paralleler Assemblierung der Systeme und strukturangepasster linearer Algebra.

<sup>1</sup> A. Schiela: **Barrier Methods for Optimal Control Problems with State Constraints**. SIAM J. Optimization 20(2): 1002–1031, 2009. <sup>2</sup> A. Schiela, A. Günther: **Interior Point Methods in Function Space for State Constraints – Inexact Newton and Adaptivity**, ZIB-Report 09-01, 2009. <sup>3</sup> P. Deuflhard, **Newton Methods for Nonlinear Problems**. Springer Series in Computational Mathematics 35, 2004. <sup>4</sup> M. Weiser, P. Deuflhard, B. Erdmann. **Affine conjugate adaptive Newton methods for nonlinear elastomechanics**. Opt. Meth. Softw. 22(3): 413–431, 2007. <sup>5</sup> [www.zib.de/Numerik/numsoft/kaskade7](http://www.zib.de/Numerik/numsoft/kaskade7)

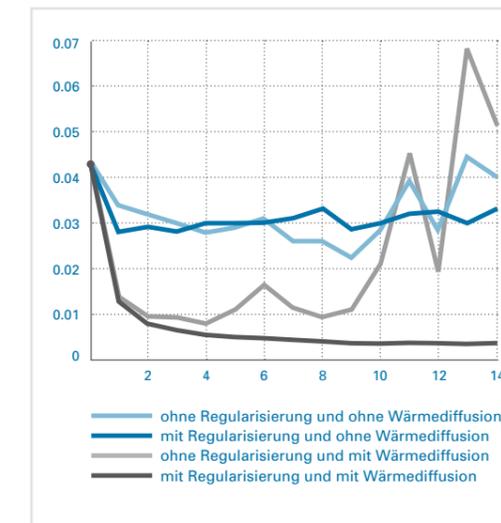


**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Regionale Hyperthermie ist eine Krebstherapie, die darauf abzielt, große und inoperable Tumoren zu erhitzen, um sie für eine begleitende Strahlen- oder Chemotherapie zu sensibilisieren. Die Wärme entsteht im Körper durch Absorption interferierender Radiowellen, die von einem amplituden- und phasengesteuerten Ringapplikator ausgehen. Aufgabe der Therapieplanung ist die Berechnung optimaler Phasen und Amplituden der einzelnen Antennen, so dass der Tumor möglichst warm, gesundes Gewebe aber nicht durch zu hohe Temperaturen geschädigt wird.

## ZIELORIENTIERTE ADAPTIVITÄT

Die Lösung der Optimalsteuerungsprobleme muss genau genug, aber möglichst nicht zu aufwendig sein. A-posteriori Fehlerschätzer werden einerseits zur Sicherstellung der Genauigkeit verwendet, andererseits auch zur Reduktion der Problemgröße durch *adaptive Gitterverfeinerung*. In Optimierungsproblemen ist der Wert des Zielfunktions ein geeignetes Fehlermaß.<sup>6</sup> Der im Vorjahr entwickelte Ansatz zur Verwendung des *reduzierten Zielfunktions*<sup>7</sup> wurde auf zustandsbeschränkte Probleme erweitert. Insbesondere für Probleme mit endlichdimensionaler Steuerung, wie der Hyperthermie-Therapieplanung, ergeben sich erhebliche Vorteile gegenüber der üblichen Verwendung des nichtreduzierten Zielfunktions.

Fehler der Temperaturvorhersagen über den Messungen für alle Kombinationen von Regularisierung und Berücksichtigung der Wärmeleitung. Der Rauschpegel in den Messdaten liegt bei 0.01.



## ADAPTION VON ANTENNENPROFILIEN

Eine wesentliche Fehlerquelle der Therapieplanung sind *Modellierungsfehler*, die durch nicht exakt reproduzierte Patientenlagerung, variierende Reflexionen im Übertragungsnetzwerk und unbekannte Gewebeeigenschaften zu fehlerhaft vorhergesagten elektrischen Feldern  $V$  der einzelnen Antennen, den Antennenprofilen, führen. In hybriden MR-Hyperthermiesystemen lässt sich während der rund zweistündigen Therapie aus MR-Messdaten die aktuelle Temperaturverteilung berechnen. Der Vergleich von vorhergesagter und gemessener Temperatur führt auf ein nichtlineares Ausgleichsproblem für die Antennenprofile, das jedoch wegen der beschränkten Anzahl an Messungen stark *unterbestimmt* ist. Es wurde daher ein Adaptionsverfahren entwickelt, das die Ergebnisse einer Planungsrechnung während der Therapie anpasst. 2009 wurde das Verfahren um die Berücksichtigung der Wärmeleitung und der Perfusion sowie um eine Regularisierung erweitert, was zu einer deutlichen Verbesserung der Temperaturvorhersagen führte (siehe Abbildung). Besonderes Augenmerk wurde auf die *Echtzeitfähigkeit* des Verfahrens gelegt, was insbesondere die Lösung eines großen gekoppelten Ausgleichsproblems ausschließt. Stattdessen werden die Ausgleichsprobleme voxelweise voneinander unabhängig gelöst, während die approximative Simulation des Wärmetransports schon vor und während der Messung erfolgen kann.<sup>8</sup>

<sup>6</sup> R. Becker, H. Kapp, R. Rannacher. **Adaptive finite element methods for optimal control of partial differential equations: basic concepts**. SIAM J. Control Optim., 39: 113–132, 2000. <sup>7</sup> M. Weiser. **On goal-oriented adaptivity for elliptic optimal control problems**. ZIB Report 09-08, 2009. <sup>8</sup> M. Ranneberg, M. Weiser, M. Wehrauch, V. Budach, J. Gellermann, P. Wust. **Regularized Antenna Profile Adaptation in Online Hyperthermia Treatment** (eingereicht).

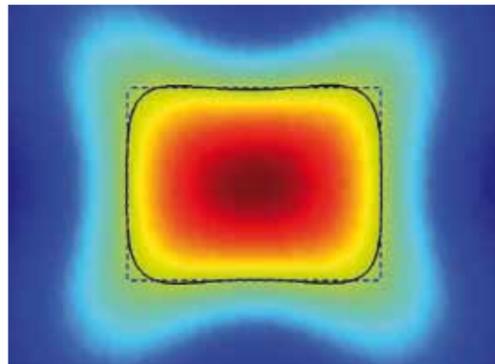
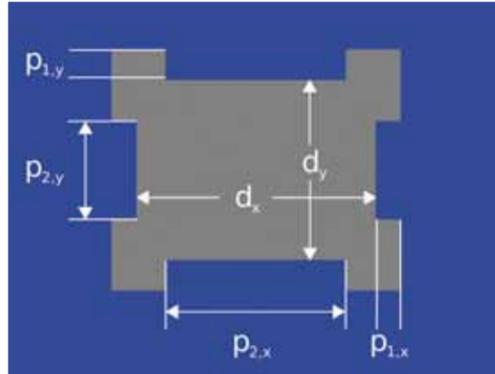
# ECHTZEITSIMULATION NANO-OPTISCHER 3D-STRUKTUREN

BEARBEITET VON: Jan Pomplun und Frank Schmidt

KOOPERATION: Frank Scholze, Physikalisch-Technische Bundesanstalt Berlin, JCMwave GmbH

FÖRDERUNG: Investitionsbank Berlin

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Numerik/projects/ProFIT\\_RB](http://www.zib.de/Numerik/projects/ProFIT_RB)



dere in Produktionsumgebungen oft die Forderung nach Echtzeitlösungen, was Rechenzeiten von Sekunden oder weniger bedeutet. Vor allem für 3D-Probleme sind die Zeiten für die Berechnung einer einzigen Vorwärtslösung dafür jedoch oft schon zu lang. Andere Beispiele, bei denen die Variation von Parametern und die schnelle Berechnung der zugehörigen Lösung eine sehr wichtige Rolle spielt, sind die Optimierung von gegebenen Strukturen in der Sensorik oder der Halbleitertechnologie.

Die Abbildung links veranschaulicht die Problemstellung an einem einfachen, aber praktisch wichtigen Beispiel aus der nanooptischen Lithographie. Ziel ist die Optimierung von Photomasken, die zur Herstellung von integrierten Schaltkreisen in allen informationstechnischen Produkten verwendet werden. Die Serifen an den Ecken des „Kontaktloches“ sollen so dimensioniert werden, dass das hindurchtretende Licht eine möglichst rechteckige Intensitätsverteilung hat. Für das Auffinden der optimalen Parameter muss die Photomaske mehrmals mit verschiedenen Serifenformen simuliert werden. Die Zeit für eine einzige Rechnung liegt dabei jedoch bereits in der Größenordnung einer Stunde, so dass eine konventionelle Optimierung extrem lange dauert.

Die Idee der Reduzierten-Basis-Methode ist es, den Lösungsprozess eines parametrisierten Problems in einen langsamen Offline- und einen schnellen Online-Schritt aufzuspalten.<sup>1</sup> In der Offline-Phase wird die reduzierte Basis selbstadaptiv aufgebaut. Dafür wird das zu Grunde liegende Problem mehrmals rigoros gelöst, wobei längere Rechenzeiten in Kauf genommen werden. Diese Lösungen bilden die Basis des reduzierten niedrigdimensionalen Systems, das man durch Projektion aus dem

Ziel der Reduzierten-Basis-Methode ist die schnelle Simulationen parametrisierter Systeme. Die Abbildung zeigt die Optimierung einer Photomaske als Beispiel: Die Form der Serifen an den Ecken eines Kontaktloches soll so gestaltet werden, dass die Intensitätsverteilung des hindurchtretenden Lichtes möglichst rechteckig ist. Ohne die Hilfsstrukturen ergeben sich stark abgerundete Ecken (sogenanntes „Corner Rounding“). Die optimierte Lichtverteilung ist unten gezeigt. Mit der Reduzierten-Basis-Methode kann die gezeigte Photomaskenoptimierung in der Größenordnung von Sekunden durchgeführt werden, im Beispiel fast 10000-mal schneller als die Berechnung des vollen Ausgangsproblems.

Oftmals werden in den optischen Technologien Komponenten oder Systeme betrachtet, die ein gegebenes, grundlegendes Layout und eine begrenzte Anzahl variabler Geometrie- und Materialparameter haben. Beispielsweise hängt bei der nanometer-genauen Bestimmung der Position von Halbleiterchips auf Wafern das optische Mess-Signal von der Position und Form der Marke ab. Für die Computersimulation solcher Messaufgaben werden im Allgemeinen sehr viele Simulationsläufe benötigt, die die gesamte Komplexität des untersuchten Systems berücksichtigen und daher sehr aufwändig sind. Zudem besteht insbeson-



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Modellierung und Simulation bilden Grundpfeiler der Entwicklung moderner optischer Technologien. Simulationen helfen, Systeme besser zu verstehen, zu designen, zu optimieren oder zu charakterisieren. In Anwendungsfeldern wie der Optimierung oder der optischen Messtechnik müssen in der Regel sehr viele Simulationen für verschiedene Systemparameter durchgeführt werden. Jede einzelne dieser Rechnungen, insbesondere für 3D Strukturen, ist im Allgemeinen sehr zeitaufwändig. Durch die Methode der Reduzierten Basen kann der Aufwand soweit reduziert werden, dass sogar Echtzeitlösungen in Produktionsumgebungen möglich werden.

ursprünglichen Problem erhält. Im Online-Schritt kann das reduzierte Problem in Sekundenbruchteilen gelöst werden. Die Reduzierte-Basis-Methode liefert aber nur approximative Lösungen des ursprünglichen, aufwändigen Problems. Um die Qualität und Verlässlichkeit der Ergebnisse sicherzustellen, ist es von großer Bedeutung, rigorose Fehlerschätzer zu konstruieren und den Aufbau des reduzierten Systems so zu gestalten, dass vorgegebene Fehlertoleranzen strikt eingehalten werden. Des Weiteren ist für die praktische Anwendung wichtig, dass die Offline-Zeit zur Konstruktion der reduzierten Basis nicht zu lang wird.

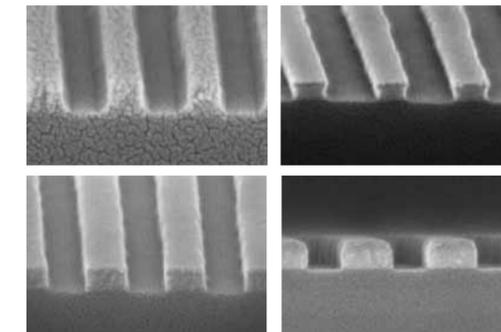
Speziell haben wir optische Streuprobleme, also die Maxwell'schen Gleichungen, auf unbeschränkten, geometrisch parametrisierten 3D-Gebieten betrachtet. Neben einem allgemeinen Verfahren zur geometrischen Parametrisierung haben wir ein neues Verfahren zur a posteriori Fehlerschätzung entwickelt. Bisherige „State-of-the-Art“ Reduzierte-Basis-Methoden waren aufgrund des sehr hohen Aufwands zur a posteriori Fehlerschätzung praktisch nicht in realistischen Situationen in 3D anwendbar. Unser neues Verfahren erlaubt es, den Rechen- und Speicheraufwand um mehrere Größenord-

nungen zu verringern. Der neue Fehlerschätzer wendet Gebietszerlegungsmethoden, die für die Fehlerschätzung von Finite Elemente Lösungen entwickelt wurden, sinngemäß auf die Problemstellung der reduzierten Basen an.<sup>2,3</sup> Des Weiteren wurde eine neue Technik für die Reduzierte-Basis-Methode entwickelt, die es erlaubt, die Reaktion von Systemen unter dem Einfluss einer Vielzahl von Quellen sehr effizient zu berechnen. Dies ist eine typische Situation in vielen nanooptischen Anwendungen, z.B. in der Lithographie, wo komplexe Maskenbeleuchtungen eingesetzt werden.

Neben der Optimierung von Photomasken<sup>4</sup> wurde die Reduzierte-Basis-Methode auf die inverse Scatterometrie von EUV (extrem ultraviolette) Masken angewandt. Dabei wurden aus gemessenen Daten durch den Vergleich zur Simulation Geometrieparameter rekonstruiert. Diese Arbeiten wurden in Kollaboration mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB) am Berliner Elektronensynchrotron BESSY II (experimentelle Messungen) und dem Advanced Mask Technology Center Dresden (Herstellung einer EUV Testmaske und Mikroskopie) durchgeführt. Die Abbildung links zeigt typische, vermessene Maskenstrukturen, deren Geometrie mit dem neuen Verfahren in Echtzeit bestimmt werden kann.

Die erzielten Ergebnisse zur schnellen Lösung nanooptischer Probleme sind sehr vielversprechend. Es ist unsere Absicht, die Methode theoretisch weiterzuentwickeln und in einem Kooperationsprojekt mit der Firma JCMwave zur kommerziellen Produktreife zu bringen.

Elektronenmikroskopische Aufnahmen von typischen Absorberstrukturen auf Photomasken. Mit Hilfe von Scatterometrie und Reduzierte-Basis-Rechnungen kann die Geometrie in Echtzeit rekonstruiert werden.



<sup>1</sup> G. Rozza, D.B.P. Huynh and A.T. Patera, „Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for affinely parametrized elliptic coercive partial differential equations: Application to transport and continuum mechanics“, MIT Pappalardo Graduate Monographs in Mechanical Engineering (2006).

<sup>2</sup> M. Ainsworth and J. T. Oden, „A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis“, 1st Edition, John Wiley and Sons, 2000. <sup>3</sup> J. Pomplun and F. Schmidt, „Accelerated A Posteriori Error Estimation for the Reduced Basis Method with Application to 3D Electromagnetic Scattering Problems“, SIAM Journal on Scientific Computing 32(2) (2010). <sup>4</sup> J. Pomplun and F. Schmidt, „Reduced basis method for computational lithography“, Photomask Technology, Proc. SPIE, Vol. 7488, 74882B (2009).

# MATHEMATISCHE SYSTEMBIOLOGIE

## MODELLIERUNG UND SIMULATION DES WEIBLICHEN HORMONZYKLUS

**BEARBEITET VON:** Susanna Röblitz, Claudia Stötzel, Peter Deuflhard

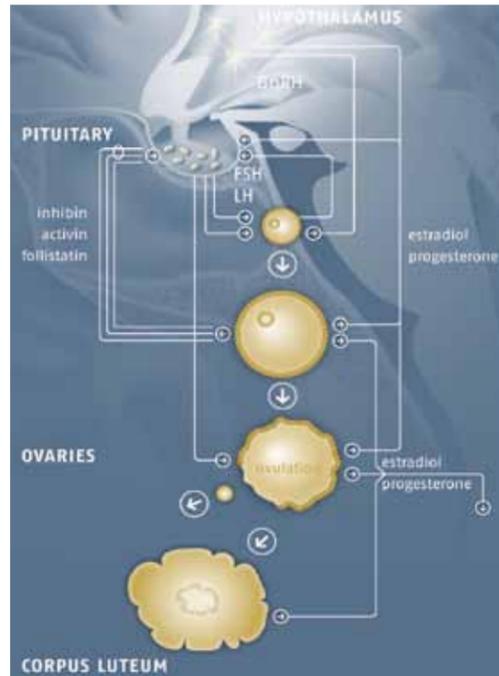
**KOOPERATIONEN:** Pharmazeutische Industrie, M. Boer, H. Woelders, R. Veerkamp (U Wageningen, NL), A. Bockmayr, H. Siebert (FU Berlin)

**FÖRDERUNG:** MATHEON A18, Pharmazeutische Industrie

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/Numerik/CompSysBio](http://www.zib.de/Numerik/CompSysBio)

Der derzeitige Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Mathematische Systembiologie liegt auf der Modellierung und Simulation des weiblichen Zyklus. In der wissenschaftlichen Literatur gibt es in dieser Richtung bisher nur wenige Arbeiten. Darin werden allenfalls Teilaspekte des Zyklus behandelt, etwa nur die hormonelle oder nur die biologisch/physiologische Seite. Um jedoch der Realität hinreichend gerecht werden zu können, benötigt man ein umfangreicheres Modell, das alle beteiligten Regelkreise erfasst, die zum Zyklus wesentlich beitragen. Ziel ist zunächst einmal, ein möglichst genaues Verständnis des Netzwerkes von gekoppelten Vorgängen in der gesunden Frau zu erreichen. Darauf aufbauend möchten wir in der Lage sein, externe Manipulationen des Zyklus ausreichend detailliert zu simulieren. Dazu gehören die Verabreichung von Medikamenten, die Gestaltung von Hormontherapien oder, allgemein, Therapien zur Bekämpfung von Krankheiten.

Die Abbildung veranschaulicht das dem weiblichen Zyklus zugrunde liegende Kompartimentmodell mit den Kompartimenten Hypothalamus, Hypophyse und Ovarien, verbunden durch den Blutkreislauf. Das Modell beschreibt qualitativ den folgenden Regelkreis: Im Hypothalamus wird das Hormon GNRH (Gonadotropin-freisetzendes Hormon) gebildet, das über das Pfortensystem in Form von Impulsen in die Hypophyse gelangt und dort die Freisetzung der Gonadotropine LH (luteinisierendes Hormon) und FSH (Follikel-stimulierendes Hormon) in den Blutkreislauf hinein stimuliert. Die Gonadotropine regulieren die Vorgänge in den Ovarien, d.h. den mehrstufigen Reifungsprozess der Follikel, den Eisprung und die Entwicklung des Gelbkörpers, welche die Synthese der Steroide Progesteron (auch Gelbkörperhormon



Physiologisches Modell des weiblichen Hormonzyklus.

### ZIEL

Umfangreiches Modell für die detaillierte Simulation des weiblichen Zyklus einschließlich externer Manipulationen

genannt) und Estradiol sowie des Hormons Inhibin steuern. Diese wiederum gelangen über das Blutssystem zum Hypothalamus und zur Hypophyse, wo sie die Bildung von GNRH, LH und FSH beeinflussen.

Solche Reaktionsmechanismen werden quantitativ mit Hilfe von Differentialgleichungen modelliert, welche die Konzentrationen der beteiligten Stoffe in Abhängigkeit von der Zeit beschreiben. Teilweise werden auch verzögerte (retardierte) Differentialgleichungen verwendet, um Transportzeiten durch das Blut oder die Regenerierung von Rezeptoren zu berücksichtigen. Für die Lösung von retardierten Differentialgleichungen im Computer benutzen wir derzeit den Code **RADAR5**.<sup>1</sup> Allerdings sind

Quantitative Modellierung mit Hilfe von retardierten Differentialgleichungen.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Im Vordergrund der systembiologischen Forschung am ZIB steht die mathematische Modellierung des weiblichen Hormonzyklus und seine effiziente Simulation. Obwohl weltweit etwa 100 Millionen Frauen regelmäßig „die Pille“ einnehmen, wurde diesem Thema aus Sicht der Mathematik bisher zu wenig Aufmerksamkeit gewidmet. Insbesondere reichen bisherige Modelle nicht aus, um etwa die Gabe von Medikamenten ausreichend genau zu simulieren. Im Idealfall können mathematische Modelle dazu beitragen, klinische Studien gezielter und zugleich kostengünstiger durchzuführen.

die exakten Reaktionsmechanismen selten bekannt. Häufig weiß man nur, ob bestimmte Hormone einen stimulierenden oder einen inhibierenden Einfluss auf andere Hormone haben. Bei der halb-quantitativen Modellierung eines solchen Schalterverhaltens kommen Hill-Funktionen zum Einsatz,

$$h^+(S; T, n) \equiv \frac{S^n}{T^n + S^n}, \quad h^-(S; T, n) \equiv 1 - h^+(S; T, n),$$

wobei  $S \geq 0$  die Konzentration des beeinflussenden Hormons bezeichnet,  $T \in \mathbb{R}_+$  den Schwellwert und  $n$  den Hill-Koeffizienten. Falls die Reaktionsmechanismen genauer bekannt sind, bspw. aus der KEGG PATHWAY Datenbank,<sup>2</sup> kann man auch detailliertere Gleichungen aufstellen. Die Expertise zum Lösen großer Systeme von Differentialgleichungen ist am ZIB vorhanden. Als Beispiele seien hier die Programme **LIMEX** (für Deskriptorsysteme) und **LARKIN** (zur Simulation von LARGE chemical KINETICS) genannt.<sup>3</sup>

Parameteridentifizierung als mathematische Herausforderung.

Aus mathematischer Sicht liegen die Schwierigkeiten nicht in der Simulation der Systeme, sondern in der Identifizierung der in den Modellen auftretenden Parameter. Nur wenige von ihnen sind messbar, von einigen kennt man immerhin den ungefähren Wertebereich, von anderen hingegen sind nicht einmal die Größenordnungen bekannt. Ziel ist, Parameterwerte interpretierbar zu bestimmen, d.h., dass nicht nur die modellierten Konzentrationsverläufe gut zu den vorgegebenen Messwerten passen, sondern dass auch Vorhersagen über den durch Messungen nicht abgedeckten Bereich zulässig werden. Da die Zahl der Messwerte in der Regel deutlich größer ist als die Zahl der Parameter, haben wir es hier mit einem überbestimmten nichtlinearen Ausgleichsproblem zu tun,

$$\|F(x)\|_2^2 = \min,$$

wobei  $x \in D \subseteq \mathbb{R}^p$  den Parametervektor bezeichnet und  $F$  die Differenz zwischen den Messdaten und einer nichtlinearen Modellfunktion  $\varphi(x)$ . Zur Minimierung dieses Funktionals eignen sich affin kovariante Gauss-Newton-Verfahren,<sup>4</sup> wie sie zum Beispiel in dem Softwarepaket **NLSCON**<sup>5</sup> implementiert sind. Im Gegensatz zu anderen Verfahren berücksichtigen die am ZIB verwendeten Methoden auch Rangdefekte, die sich aus Abhängigkeiten zwischen den Parametern ergeben, und gestatten Aussagen über die Kompatibilität zwischen Modell und Daten.

Die beschriebenen Mechanismen und mathematischen Methoden bilden die Grundlage des Modells **GynCycle**, das von I. Reinecke im Rahmen ihrer Dissertation<sup>6</sup> am ZIB entwickelt wurde und rasch auf großes Interesse bei der pharmazeutischen Industrie stieß. Wie weitergehende Studien im vergangenen Jahr gezeigt haben, ist dieses Modell jedoch noch nicht ausgereift. Insbesondere konnten wir die Modellierung der GNRH-Regulation substantiell verbessern, wodurch wir nun in die Lage kommen, die Verabreichung von GNRH-Agonisten und Antagonisten zu simulieren. Die dazu notwendigen Daten werden uns unter anderem im Rahmen eines Kooperationsvertrages von einem Pharmakonzern (Geheimhaltungsvereinbarung) zur Verfügung gestellt. Darüber hinaus wollen wir in Zukunft nicht nur den idealisierten Zyklus einer „idealisierten Frau“ modellieren, sondern individuelle „virtuelle“ Patientinnen durch belastbare Modelle beschreiben.

<sup>1</sup> N. Guglielmi, E. Hairer: **Implementing RADAU IIA methods for stiff delay differential equations**. Computing, Bd. 67, pp. 1–12, 2001.

<sup>2</sup> [www.genome.jp/kegg/pathway.html](http://www.genome.jp/kegg/pathway.html) <sup>3</sup> [www.zib.de/nowak/codes.html](http://www.zib.de/nowak/codes.html) <sup>4</sup> P. Deuflhard: **Newton Methods for Nonlinear Problems**, Springer, 2004.

<sup>5</sup> [www.zib.de/Numerik/numsoft/CodeLib/nonlin.en.html](http://www.zib.de/Numerik/numsoft/CodeLib/nonlin.en.html) <sup>6</sup> I. Reinecke: **Mathematical modeling and simulation of the female menstrual cycle**, Dissertation, FU Berlin, 2008.

## PROJEKTE DER ABTEILUNG NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.zib.de/Numerik/projects/index.de.html](http://www.zib.de/Numerik/projects/index.de.html)

### DIE MATHEMATIK BIOMOLEKULARER FLEXIBILITÄT

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A4](http://www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A4)

**Bearbeitet von:** A. Bujotzek, S. Röblitz, M. Weber, M. Klimm, P. Deuffhard

**Kooperation:** C. Schütte (FU Berlin)

**Förderung:** MATHEON, Projekt A4

**Inhalt:** In diesem Projekt wird die Markov-Eigenschaft biomolekularer Prozesse untersucht. Es werden Methoden zur statistischen Umgewichtung von Zeitreihendaten entwickelt. Dies ist eine mathematisch anspruchsvolle Aufgabe, wenn bei der Simulation der Systeme „explizites“ Wasser eine Rolle spielt.

### MODELLIERUNG VON BINDUNGS-AFFINITÄTEN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/bamCoop](http://www.zib.de/Numerik/projects/bamCoop)

**Bearbeitet von:** V. Durmaz, K. Andrae, M. Weber, B. Kallies, O. Scharfkoj

**Kooperation:** R. Becker, C. Piechotta (BAM)

**Förderung:** BAM

**Inhalt:** In verschiedenen Projekten werden Wechselwirkungen von kleinen Molekülen mit humanen Hormonrezeptoren simuliert oder die Trenneigenschaften chiraler Phasen in HPLC-Anlagen untersucht. Hierzu werden auf Basis molekularer Simulationen theoretische Deskriptoren der Molekülsysteme entwickelt. Mittels Parameterschätzung und experimenteller Daten können so prädiktive mathematische Modelle bestimmt werden.

### ENTROPIEUNTERSUCHUNG MULTIVALENTER SPACER

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/SFB-765](http://www.zib.de/Numerik/projects/SFB-765)

**Bearbeitet von:** A. Bujotzek, O. Schütt, K. Andrae, S. Röblitz, M. Weber, P. Deuffhard

**Förderung:** SFB 765, Projekt C2

**Inhalt:** Spacer werden in der Chemie benötigt, um mehrere gleichartige Wirkstoffmoleküle miteinander zu verbinden. Hierdurch entsteht ein kooperativer Effekt bei der Bindung dieser Systeme an ein Target-Protein, die Bindungsstärke nimmt überproportional zu. In dem Projekt wird der entropische Einfluss der Spacer auf die Wirkstoffbindung untersucht und simuliert. Die Schätzung von Entropie-Werten aus Konformationsdynamiksimulationen wird erforscht.

### DESIGN VON OPIOIDEN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/compDrugDesign](http://www.zib.de/Numerik/projects/compDrugDesign)

**Bearbeitet von:** M. Weber, O. Scharfkoj, P. Deuffhard

**Kooperation:** C. Stein (Charité Berlin),

C. Zöllner (Universitätsklinikum Hamburg-Eppendorf)

**Inhalt:** Das Ziel des Projekts ist das Design eines Schmerzmittels, das nur im entzündeten Gewebe aktiv ist und somit verminderte Nebenwirkungen im Vergleich zu gängigen Opioiden hat. Es ist uns gelungen, einen Kandidaten zu entwickeln, welcher synthetisiert wurde und derzeit in vitro und in vivo Experimenten an der Charité Berlin unterzogen wird.

### PRÄSELEKTION VON ANTIKÖRPERKLONEN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/ChemReact](http://www.zib.de/Numerik/projects/ChemReact)

**Bearbeitet von:** M. Berg, U. Nowak, S. Röblitz

**Kooperation:** aokin AG

**Inhalt:** In diesem Projekt geht es um die Entwicklung eines Verfahrens zur Bestimmung der Bindungseigenschaften von Antikörpern mittels kinetischer Fluoreszenz-Polarisation. Um den hohen Messaufwand und Stoffbedarf zu reduzieren, soll ein kinetisches Reaktionsmodell erstellt und simuliert werden. Durch Abgleich des Modells mit den Messwerten sollen die unbekannt Parameter, soweit möglich, identifiziert werden.

### MODELLIERUNG UND SIMULATION DES WEIBLICHEN HORMONZYKLUS

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/MenstrualCycle](http://www.zib.de/Numerik/projects/MenstrualCycle)

**Bearbeitet von:** C. Stötzel, S. Röblitz, P. Deuffhard

**Kooperation:** Zentrum für Tierzucht und Genomik, Universität Wageningen, NL,

Pharmazeutische Industrie

**Förderung:** Pharmazeutische Industrie

**Inhalt:** Ziel des Projektes ist die Erstellung eines mathematischen Modells, mit dem externe Manipulationen des Zyklus, wie z.B. die Gabe von Medikamenten qualitativ und quantitativ beschrieben werden können. Bereits existierende Modelle sind dazu nicht in der Lage. Die von den Kooperationspartnern zur Verfügung gestellten Daten dienen als Grundlage für eine Parameteridentifizierung, bei der zahlreiche am ZIB entwickelte mathematische Methoden zum Einsatz kommen.

### GITTERFREIE DISKRETE GALERKIN-VERFAHREN FÜR DIE CHEMISCHE MASTERGLEICHUNG

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A13](http://www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A13)

**Bearbeitet von:** S. Röblitz, M. Weber, P. Deuffhard

**Kooperation:** T. Jahnke (TH Karlsruhe),

M. Wulkow (CiT GmbH), W. Huisinga

(Hamilton Institute, Dublin)

**Förderung:** MATHEON, Projekt A13

**Inhalt:** Die chemische Mastergleichung beschreibt Reaktionssysteme, bei denen stochastische Einflüsse berücksichtigt werden müssen. Aus mathematischer Sicht ist dies eine diskrete partielle Differentialgleichung, deren Dimension sehr groß sein kann. Ziel ist die Erweiterung des diskreten Galerkin-Verfahrens auf gitterfreie Ansatzfunktionen.

### BERECHNUNG VON ERWARTUNGSWERTEN IN DER MOLEKULAREN QUANTENDYNAMIK

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/QuantDyn](http://www.zib.de/Numerik/projects/QuantDyn)

**Bearbeitet von:** S. Röblitz

**Kooperation:** C. Lasser (FU Berlin)

**Inhalt:** Im Mittelpunkt dieses Projektes steht eine Partikelmethode zur Berechnung von Erwartungswerten für die Lösung der nuklearen Schrödingergleichung. Der Vorteil des von uns entwickelten Algorithmus gegenüber anderen Verfahren besteht insbesondere in der sehr kurzen Rechenzeit sowie der Möglichkeit der Fehlerkontrolle. Die analytisch vorausgesagte Genauigkeit des Verfahrens konnte mit Hilfe numerischer Experimente verifiziert werden.

### QUANTITATIVE DEFECTREKONSTRUKTION IN DER AKTIVEN THERMOGRAPHIE

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/BAM-Thermography](http://www.zib.de/Numerik/projects/BAM-Thermography)

**Bearbeitet von:** S. Götschel, B. Erdmann, M. Weiser

**Kooperation:** C. Maierhofer (BAM)

**Förderung:** BAM

**Inhalt:** Thermographie wird zur Erkennung von Fehlstellen in verschiedenen Materialien verwendet. Wir entwickeln neuartige adaptive numerische Methoden zur zuverlässigen Simulation der Impuls-Thermographie sowie zur quantitativen Bestimmung von Tiefe und Form von Fehlstelle.

### MODELLIERUNG UND SIMULATION DES MENSCHLICHEN GANGES

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-A2-HUMOT](http://www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-A2-HUMOT)

**Bearbeitet von:** C. Klapproth, A. Schiela, P. Deuffhard

**Kooperation:** R. Kornhuber (FU Berlin)

**Förderung:** MATHEON, Projekt A2

**Inhalt:** Eine computergestützte Planung orthopädischer Operationen erfordert die Simulation von elastischen Spannungen und Deformationen im Kniegelenk, die durch ein dynamisches Kontaktproblem modelliert werden. Aufbauend auf Konsistenzresultaten für das kontaktstabilisierte Newmark-Verfahren in einer speziellen Norm wurde eine adaptive Zeitsteuerung des Verfahrens entwickelt.

### MEHRKÖRPER-ALGORITHMEN FÜR DAS MUSKULOSKELETALE SYSTEM DES MENSCHEN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/SFB-C5](http://www.zib.de/Numerik/projects/SFB-C5)

**Bearbeitet von:** R. Ehrig

**Kooperation:** G. Duda (Charité)

**Förderung:** SFB 760, Projekt C5

**Inhalt:** Es werden Methoden zur Bestimmung der skelettalen Kinematik aus optischen oder fluoroskopischen Markerdaten entwickelt. Wesentlich ist die Unterdrückung von Weichteilartefakten bei der Bestimmung von Gelenkzentren und -achsen. Das patentierte Verfahren liefert ausreichende Genauigkeit für chirurgische Eingriffe.

### TRAJEKTORIENKOMPRESSION

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-F9](http://www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-F9)

**Bearbeitet von:** S. Götschel, M. Weiser

**Kooperation:** K. Polthier (FU Berlin)

**Förderung:** MATHEON, Projekt F9

**Inhalt:** Die Berechnung reduzierter Gradienten für große, nichtlineare und zeitabhängige Optimalsteuerungsprobleme durch adjungierte Methoden erfordert die Speicherung umfangreicher Zustandsstrajektorien. Wir untersuchen verlustbehaftete Kompressionsverfahren, die auf hierarchischer Interpolation in adaptiv verfeinerten Gittern basieren.

### KREBSTERAPIE REGIONALE HYPERTHERMIE

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A17](http://www.zib.de/Numerik/projects/Matheon-A17) und [www.zib.de/Numerik/projects/Hyper-OC](http://www.zib.de/Numerik/projects/Hyper-OC)

**Bearbeitet von:** M. Weiser, A. Schiela, P. Deuffhard, M. Ranneberg, J. Gellermann

**Kooperation:** P. Wust (Charité)

**Förderung:** MATHEON, Projekt A17, DFG EP WU 235/3-1

**Inhalt:** Die Therapieplanung führt auf ein zustandsbeschränktes Optimalsteuerungsproblem. Dafür werden adaptive Innere-Punkte-Methoden entwickelt, die für nichtkonvexe Probleme geeignet sind.

Weiterhin wurden echtzeitfähige Verfahren zur Identifikation von Antennenprofilen entwickelt, die eine Online-Nachoptimierung anhand von MR-Meßdaten während der Therapie ermöglichen.

### SIMULATION DER ELEKTRISCHEN HERZERREGUNG

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/cardio](http://www.zib.de/Numerik/projects/cardio)

**Bearbeitet von:** M. Weiser, B. Erdmann, P. Deuffhard

**Kooperation:** L. Pavarino (U Milano), G. Seemann (KIT)

**Inhalt:** Die Erregung des Herzmuskels wird durch ein System von Reaktions-Diffusions-Gleichungen beschrieben, deren numerische Lösung aufgrund stark unterschiedlicher Zeit- und Ortsskalen herausfordernd ist. In diesem Projekt entwickeln wir strukturausnutzende Verfahren zur Reduktion des Rechenaufwands bei gleichzeitiger Kontrolle des Diskretisierungsfehlers.

### THEORIE DER RAUM-ZEIT AUFGELOSTEN OPTISCHEN DYNAMIK IN HYBRID-NANOSTRUKTUREN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/SPP-1391](http://www.zib.de/Numerik/projects/SPP-1391)

**Bearbeitet von:** J. Pomplun, A. Schliwa, F. Schmidt

**Kooperation:** M. Richter, A. Knorr

(TU Berlin)

**Förderung:** DFG SPP139

**Inhalt:** Wir untersuchen (a) den Transfer auf nm-Skalen in Metallen und Halbleitern, und (b) die interne Dynamik von zusammengesetzten Elementaranregungen. Dazu wird eine Hierarchie von Modellen für die Materialgleichungen aufgestellt und deren Eigenschaften mittels Simulation untersucht. Für die zeitabhängige Rechnung der optischen Felder wird ein discontinuous-Galerkin-Verfahren implementiert.

### MODELLIERUNG UND SIMULATION VON VCSELN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/SFB-787-B4](http://www.zib.de/Numerik/projects/SFB-787-B4)

**Bearbeitet von:** J. Pomplun, F. Schmidt

**Kooperation:** A. Mielke, U. Bandelow, Th. Koprucki (WIAS Berlin)

**Förderung:** DFG SFB 787 /Projekt B4

**Inhalt:** In einer Kooperation von WIAS und ZIB werden semiklassische Modelle für 3D VCSEL-Strukturen entwickelt, analysiert und implementiert. Das Projekt beinhaltet die Entwicklung einer Modellhierarchie für eine selbstkonsistente Beschreibung von Ladungstransport, Temperaturverteilung und optischen Feldern und eine adäquate Umsetzung in numerische Algorithmen.

### FUNKTIONALE NANOSTRUKTUREN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D15FuncNanoStruct](http://www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D15FuncNanoStruct)

**Bearbeitet von:** B. Kettner, F. Schmidt

**Kooperation:** H. Kalt, M. Wegener

(CFN Karlsruhe), JCMwave GmbH

**Förderung:** MATHEON, Projekt D15

**Inhalt:** Im Fokus stehen Untersuchungen zu Metamaterialien und Nano-Resonatoren. Metamaterialien bilden eine neue Klasse von Werkstoffen, mit denen man die klassische Auflösungsgrenze optischer Abbildungen umgehen kann. Nano-Resonatoren sind Grundbausteine zukünftiger quantenoptischer Informationsverarbeitungssysteme. Mathematik liefert hier die Grundlage für die technologische Entwicklung.

### DESIGN NANOPHOTONISCHER BAUELEMENTE

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D9PhotonicDevices](http://www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D9PhotonicDevices) und [www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D9PhotonicFields](http://www.zib.de/Numerik/projects/MATHEON-D9PhotonicFields)

**Bearbeitet von:** T. Pollok, A. Schädle, F. Schmidt

**Kooperation:** JCMwave GmbH

**Förderung:** MATHEON, Projekt D9

**Inhalt:** Wir bearbeiten folgende Probleme des Entwurfs optischer Chips: (a) die zeitharmonische Streuung von Strahlen an beliebigen Objekten, (b) die Berechnung von Feldern entlang optischer Wellenleiter. Dazu wird ein FE-Paket zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen in 3D entwickelt, das Streuung in heterogenen unbeschränkten Räumen berechnen kann. Theoretische Grundlage hierfür sind die von uns entwickelte Polbedingung und eine darauf aufbauende PML-Variante.

### ECHTZEITSIMULATION NANOOPTISCHER 3D-STRUKTUREN

**URL:** [www.zib.de/Numerik/projects/ProFIT\\_RB](http://www.zib.de/Numerik/projects/ProFIT_RB)

**Bearbeitet von:** J. Pomplun, F. Schmidt

**Kooperation:** F. Scholze (Physikalisch-Technische Bundesanstalt Berlin), JCMwave GmbH

**Förderung:** Investitionsbank Berlin

**Inhalt:** Für die Entwicklung neuester optischer Technologien sind numerische Simulationen unerlässlich. In diesem Projekt werden Methoden entwickelt, die es erlauben, komplexe optische Probleme in Echtzeit mit kontrollierter Genauigkeit zu lösen. Anwendungsfelder sind z.B. die Optimierung nanooptischer Systeme.

**ABTEILUNG**

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

 **VISUALISIERUNG  
UND DATENANALYSE**

OPTIMIERUNG

WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE

# VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

LEITUNG: Hans-Christian Hege

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/visual](http://www.zib.de/visual)

Visualisierungsmethoden spielen eine Schlüsselrolle bei der Analyse von Daten aus Computersimulationen und Messungen. Die Datenvisualisierung hat sich zu einer eigenständigen Forschungsdisziplin an der Schnittstelle von Computergrafik, Mensch-Computer-Interaktion und Datenanalyse entwickelt – mit dem Ziel, die Visualisierungspipeline unter technischen, algorithmischen, perzeptuellen und kognitiven Gesichtspunkten zu verbessern. In der Ausrichtung unserer Forschungsthemen spiegeln sich allgemeine Trends wider:

1. Aussagekräftige Visualisierungen erfordern eine Analyse der darzustellenden Daten; die algorithmische Datenanalyse steht heute häufig im Vordergrund.
2. Der Wert von Visualisierungstechniken bemisst sich an ihrer Effektivität in konkreten Anwendungen; Fortschritte sind daher oft an spezifische Analysefragen in definierten Anwendungsszenarios geknüpft.
3. Bilddaten stellen eine Hauptquelle von Informationen dar; deshalb sind Techniken der Bildverarbeitung wichtig, was zu dem erweiterten Fach „Visual Computing“ führte. Da auch geometrische Objekte berechnet, analysiert und dargestellt werden, spielt die Geometrieverarbeitung eine ebenso wichtige Rolle. Auf eine enge Verzahnung von Data-Mining, Visualisierung und Interaktionstechniken zielt das junge Teilgebiet „Visual Analytics“.
4. Die Analyse großer Datensätze erfordert eine effiziente Nutzung von programmierbaren, massiv-parallelen Grafikarchitekturen.

## STRUKTUR

Die Abteilung gliedert sich derzeit in vier Arbeitsgruppen:

- **Visualisierungsalgorithmen**  
(Ltg. Hans-Christian Hege)
- **Visualisierungssysteme**  
(Ltg. Dr. Steffen Prohaska)
- **Vergleichende Visualisierung**  
(Ltg. Dr. Ingrid Hotz)
- **Medizinische Planung**  
(Ltg. Dr. Stefan Zachow)

## SPIN-OFFS

Aus der Abteilung entstanden bisher vier Ausgründungen, die jüngste (das Start-Up „Laubwerk – Digital Botany“) zum Jahreswechsel 2009/2010.

## VISUALISIERUNGSLGORITHMEN

Ein neues Forschungsprojekt widmet sich der Visualisierung von Daten mit statistischen Unsicherheiten. Für die Analyse von Strömungsfeldern wurden Verfahren entwickelt, die aus Strömungsdaten kohärente, langlebige Strukturen herausfiltern (SFB 557<sup>1</sup>). In Kooperation mit Quantenchemikern (Manz, Paulus; FU Berlin) und Mathematikern (Lasser; FU Berlin) wurden Verfahren zur Darstellung von Simulationsresultaten erarbeitet und Effekte der gekoppelten Kern- und Elektronenbewegung analysiert. Für die Neurobiologie (Koop. Sakmann; MPI Florida<sup>2</sup>) wurden Verfahren zur Rekonstruktion von neuronalen Netzen aus 3D-Mikroskopieaufnahmen und für die Zellbiologie (Koop. Hyman; MPI CBG<sup>3</sup>) zur Extraktion von Mikrotubuli aus Elektronentomogrammen entwickelt.

## VISUALISIERUNGSSYSTEME

Visualisierungsverfahren werden in die Softwaresysteme **Amira** (Koop. VI<sup>4</sup>) und **Avizo** (Koop. VSG<sup>5</sup>) integriert. Kooperationspartner des ZIB erhalten diese kostenfrei.<sup>6</sup> **Amira** und **Avizo** wurden zur Analyse des Porenraums in CT-Aufnahmen von Bodenproben (Koop. BAM<sup>7</sup>), zur Analyse von Aktinfilamenten in Elektronentomogrammen (Koop. Baumeister, MPI Biochemie<sup>8</sup>), zur Analyse von Strömungsdaten, um eine effiziente GPU-basierte Darstellung von Molekülen und um den Export von Klimavisualisierungen zur Darstellung in Google Earth (Koop. Planetarium Hamburg) erweitert. Das Visualisierungssystem **Biosphere3D**<sup>9</sup> zur interaktiven Darstellung von Landschaften wird im Rahmen des Berliner Skulpturennetzwerks – eines Folgeprojektes des Exzellenzclusters TOPOI – erweitert, um das antike Pergamon im räumlichen Umfeld darzustellen.

## VERGLEICHENDE VISUALISIERUNG

Um Daten in ihrer Gesamtheit zu verstehen ist es wichtig, die Daten „spielerisch“ zu analysieren; dazu sind spezifische Merkmale zu extrahieren und grafisch darzustellen. In diesem Kontext wurde ein Modul zur Exploration von Tensorfeldern entwickelt. Das zentrale Prinzip ist die Darstellung der Daten aus verschiedenen „Perspektiven“: (i) räumliche, (ii) statistische, (iii) topologische und (iv) – für ausgewählte Daten – auch physikalische. Durch eine Verlinkung dieser Darstellungen wird eine interaktive Merkmalsdefinition unterstützt. Zum merkmalsbasierten Vergleich von Vektorfeldern wurden topologische Verfahren und Mustererkennungsmethoden weiterentwickelt.

## MEDIZINISCHE PLANUNG

Aus medizinischen Bilddaten werden mit Methoden der Bild- und Geometrieverarbeitung verlässliche 3D-Modelle individueller anatomischer Strukturen rekonstruiert. Solche Modelle werden zur interaktiven Therapieplanung sowie zur Analyse und visuellen Bewertung von simulierten therapeutischen Effekten in medizinischen Anwendungsgebieten eingesetzt. Dazu gehören u.a. (a) die funktionelle Rhinochirurgie, bei der untersucht wird, wie operative Veränderungen der nasalen Atemwege die Nasenströmung beeinflussen, (b) die Kopfchirurgie, bei der Auswirkungen von Veränderungen der knöchernen Anatomie auf umliegende Weichgewebe bewertet werden, und (c) die orthopädische Chirurgie, bei der anatomische Modelle gezielt verändert werden und mit numerischen Simulationen eine funktionelle Analyse durchgeführt wird (DeSSOS,<sup>10</sup> SFB 760<sup>11</sup>).

<sup>1</sup> SFB 557 – Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen <sup>2</sup> Max Planck Florida Institute, [www.maxplanckflorida.org](http://www.maxplanckflorida.org) <sup>3</sup> Max-Planck-Institut für Molekulare Zellbiologie und Genetik, [www.mpi-cbg.de](http://www.mpi-cbg.de)

<sup>4</sup> Visage Imaging, [www.amira.com](http://www.amira.com) <sup>5</sup> VSG, Visualization Sciences Group, [www.vsg3d.com](http://www.vsg3d.com) <sup>6</sup> Webseite des ZIB zur Software Amira: [www.amira.zib.de](http://www.amira.zib.de)

<sup>7</sup> Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, [www.bam.de](http://www.bam.de) <sup>8</sup> Max-Planck-Institut für Biochemie, [www.biochem.mpg.de](http://www.biochem.mpg.de) <sup>9</sup> [www.biosphere3d.org](http://www.biosphere3d.org)

<sup>10</sup> EU-Projekt DeSSOS – Decision Support Software for Orthopaedic Surgery <sup>11</sup> SFB 760 – Biomechanik und Biologie der muskuloskeletalen Regeneration – von der Funktion zur gesteuerten Geweberegeneration

# MERKMALSEXTRAKTION UND VISUALISIERUNG FÜR STRÖMUNGSFELDER

**BEARBEITET VON:** Jens Kasten, Christoph Petz, Daniel Baum, Ingrid Hotz, Hans-Christian Hege, Steffen Prohaska

**KOOPERATION:** Bernd R. Noack (Institut P<sup>2</sup>, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA), Tino Weinkauff (Courant Institute of Mathematical Sciences)

**FÖRDERUNG:** DFG SFB 557 Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen, DFG Emmi-Noether Nachwuchsgruppe, VSG Visualization Sciences Group, Bordeaux, Frankreich

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/visual/projects/flowanalysis2](http://www.zib.de/visual/projects/flowanalysis2)



Automatisch ermittelte Wirbelregionen am Modell eines Flugzeugflügels; die Hierarchiestufen sind durch Einfärbungen kenntlich gemacht.



Lagrangesche Strömungsmerkmale hinter einem umströmten Zylinder, dargestellt durch den Ljapunow-Exponent für begrenzte Zeitintervalle – Separation in rot und Konvergenz in blau.

## HINTERGRUND

In den letzten zwei Jahrzehnten wurden computergrafische Verfahren zur Visualisierung von stationären und instationären Strömungsphänomenen in 2D und 3D erforscht. Die entwickelten Methoden werden heute in der Forschung und Industrie zur visuellen Analyse von Strömungsdaten eingesetzt. Trotz fortschrittlicher Visualisierungstechniken sind komplexe Strömungsphänomene häufig nur schwer zu erfassen. Weiterhin wächst mit zunehmender Größe und Komplexität von Strömungsdaten der Bedarf an Werkzeugen zur automatisierten Analyse und effektiven Visualisierung.

In einschlägigen Fachbüchern und Journalen, wie etwa dem verbreiteten Lehrbuch „Bounda-

ry layer theory“<sup>1</sup> oder dem renommierten Journal of Fluid Mechanics finden sich meisterhafte Handzeichnungen, die typische Strömungscharakteristiken bildhaft vermitteln. Ziel unserer Arbeit am ZIB ist, Verfahren zur Visualisierung und Datenanalyse zu entwickeln, die aus simulierten oder gemessenen Strömungsdaten ähnlich aussagekräftige Darstellungen möglichst automatisch erzeugen. Die wesentlichen Charakteristika von Strömungen, oft „Merkmale“ genannt, werden als 1-, 2- oder 3-dimensionale geometrische Objekte definiert und stehen für Konzepte aus der Strömungsforschung, wie etwa Staupunkte, Wirbelkernlinien oder Wirbelregionen. Strömungsexperten entwickeln im Laufe ihrer Ausbildung ein intuitives Verständnis für derartige Konzepte anhand von

<sup>1</sup> H. Schlichting: **Boundary-Layer Theory**. McGraw-Hill (1979).



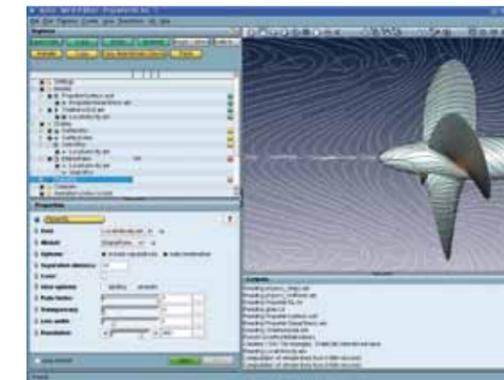
**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Strömungen spielen eine wichtige Rolle in naturwissenschaftlichen, technischen und medizinischen Anwendungen. Wir entwickeln Methoden zur merkmalsbasierten Analyse von Strömungen und zur Visualisierung von Strömungscharakteristiken mit dem Ziel, die typischen Charakteristika, wie Staupunkte, Wirbelkernlinien oder Wirbelregionen, bildhaft zu vermitteln. Unser Schwerpunkt ist die robuste Erkennung von relevanten Merkmalen in zeitabhängigen Strömungen. Erfolgreiche Verfahren integrieren wir in das Visualisierungssystem **Avizo**, wodurch eine Vielzahl von Strömungsexperten sie direkt nutzen können.

Beispielen; eine mathematische Definition fehlt jedoch häufig. Es ist daher ein wesentlicher Teil unserer Forschung, solche mathematischen Definitionen zu entwickeln. Ist eine eindeutige mathematische Charakterisierung gefunden, müssen Algorithmen entwickelt werden, die solche Merkmale in Strömungsdaten effizient und robust erkennen. Im letzten Schritt werden Visualisierungstechniken entwickelt, mit denen sich die detektierten Merkmale effektiv darstellen lassen.

## FORSCHUNGSERGEBNISSE

Auf der Konferenz EuroVis 2009, die die Abteilung Visualisierung und Datenanalyse des ZIB federführend organisierte, präsentierten wir ein Verfahren zur Extraktion von hierarchischen Wirbelregionen,<sup>2</sup> wie in der Abbildung links oben zu sehen. Eine Methode zur aussagekräftigen Platzierung von Stromlinien stellten wir auf dem IEEE Pacific Visualization Symposium 2009 vor.<sup>3</sup>

Benutzerinterface des Visualisierungssystems **Avizo**.



Im Fokus unserer Arbeit standen Verfahren zur Erkennung von kohärenten Strukturen und zur Verfolgung ihrer zeitlichen Entwicklung. Eine wesentliche Neuentwicklung war die Einführung der Lagrangeschen Gleichgewichtspunkte (lokale Minima der Beschleunigung). Durch Herausfiltern von langlebigen Strukturen mit niedriger Beschleunigung können unter anderem die zeitabhängigen Wirbelkernlinien gefunden werden.<sup>4</sup> Ein weiteres Verfahren, das kohärente Strukturen erkennt, nutzt den Ljapunow-Exponenten für begrenzte Zeitintervalle.<sup>5</sup> Eine entsprechende Visualisierung (siehe Abbildung links unten) wurde von der Gallery of Fluid Motion der amerikanischen Fachorganisation American Institute of Physics ausgezeichnet.<sup>6</sup> Ein Überblick zu unseren Resultaten findet sich in der Arbeit von J.Kasten, T. Weinkauff et al.<sup>7</sup>

## TECHNOLOGIETRANSFER

Erprobte Verfahren integrierten wir zusammen mit unserem Kooperationspartner VSG Visualization Sciences Group in das kommerzielle Visualisierungssystem **Avizo** (siehe Abbildung links). So stehen jetzt moderne Visualisierungsverfahren, die wir in den Vorjahren entwickelt hatten, einem breiten Nutzerkreis in einer integrierten Softwareumgebung zur Verfügung. Dieser Erfolg bot die Grundlage für eine Erweiterung der industriellen Zusammenarbeit: zusätzlich zum etablierten Technologietransfer vereinbarten wir mit VSG eine Kooperation zur Analyse von zeitabhängigen Strömungen, in deren Rahmen wir die oben beschriebenen Verfahren nun ebenfalls einer breiten Nutzerbasis zugänglich machen werden. Davon profitieren auch die Partner des ZIB, die **Avizo** im Rahmen von Forschungsk Kooperationen nutzen können.

<sup>2</sup> C. Petz, J. Kasten, S. Prohaska, H.-C. Hege: **Hierarchical Vortex Regions in Swirling Flow**. *Computer Graphics Forum*, Vol. 28 (3), pp. 863–870, 2009.

<sup>3</sup> O. Rosanwo, C. Petz, S. Prohaska, I. Hotz, H.-C. Hege: **Dual Stream-line Seeding**. *Proc. IEEE Pacific Visualization Symposium*, pp. 9–16, 2009. <sup>4</sup> J. Kasten, I. Hotz, B. Noack, H.-C. Hege: **On the Extraction of Long-living Features in Unsteady Fluid Flows**. *Topology-Based Methods in Visualization III*, Springer (in press). <sup>5</sup> J. Kasten, C. Petz, I. Hotz, B.R. Noack, H.-C. Hege: **Localized Finite-time Lyapunov Exponent for Unsteady Flow Analysis**. *Proc. Vision Modeling and Visualization*, pp. 265–274, 2009. <sup>6</sup> J. Kasten, C. Petz, I. Hotz, G. Tadmor, B.R. Noack, H.-C. Hege: **Lagrangian Feature Extraction of the Cylinder Wake**. *Gallery of Fluid Motion Award*, American Physical Society, Division of Fluid Dynamics, Minnesota, MN, U.S.A., 2009. <sup>7</sup> J. Kasten, T. Weinkauff, C. Petz, I. Hotz, B. R. Noack, H.-C. Hege: **Visualization and Analysis of Actuated Flows**. *Proc. Active Flow Control II*, 2010 (in press).

## MODELLGESTÜTZTE ANATOMIEREKONSTRUKTION

**BEARBEITET VON:** Dagmar Kainmüller, Hans Lamecker, Heiko Seim, Stefan Zachow

Jalda Dworzak, Bertram Woelk, Antonia Wittmers, Jana Malinowski, Max Kahnt und Matthias Bindernagel

**KOOPERATION:** Charité Berlin – Universitätskliniken: Wien, Hannover, Köln und weitere – Universität Southampton, School of Bioengineering – Philips Research Hamburg – Stryker Trauma Kiel – und weitere

**FÖRDERUNG:** durch die Europäische Union, die Deutsche Forschungsgemeinschaft und durch industrielle Drittmittel aus dem Bereich der Medizintechnik

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/visual/medical](http://www.zib.de/visual/medical)

Medizinische Operationsplanung am Computer umfasst die Arbeitsschritte Visualisierung und zielgerichtete Modifikation von anatomischen Modellen sowie Simulation und Visualisierung des daraus resultierenden Ergebnisses. Die ZIB-Arbeitsgruppe Medical Planning beschäftigt sich mit der Konzeption, Implementierung und Anwendung von grafisch-interaktiven, modellgestützten Planungswerkzeugen für klinisch relevante Aufgabenstellungen – vorrangig der orthopädischen und der plastisch-ästhetischen Chirurgie. Für die modellgestützte Planung werden Verfahren zur geometrischen 3D-Rekonstruktion individueller anatomischer Strukturen aus medizinischen Bilddaten entwickelt. Die geometrische Modellierung umfasst dabei die Erstellung von Oberflächenvernetzungen und Volumengittern mit problemangepasster, adaptiver Steuerung der Auflösung, sowie deren Anpassung an problemspezifische Anforderungen für die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen.<sup>1,2,3</sup>

Zur Rekonstruktion von anatomischen Strukturen aus medizinischen Bilddaten werden innovative Verfahren der Bild- und Geometrieverarbeitung entwickelt, die auf Formwissen basieren. Dieses Formwissen wird über eine repräsentative Stichprobe unterschiedlicher Formen ein und derselben Struktur gewonnen und durch ein statistisches 3D Formmodell repräsentiert. Solche 3D-Formmodelle liefern eine Aussage über die mittlere Form sowie die Variationsbreite aller auftretenden Formen der zugrundeliegenden Stichprobe.

Bereits 2007 konnte mit Hilfe statistischer 3D-Formmodelle erfolgreich demonstriert werden, wie in automatisierter Form die Leber aus kontrastverstärkten CT-Aufnahmen segmentiert werden kann. Nachfolgend wurde die automa-



### ABBILDUNG LINKS

3D-Rekonstruktion des knöchernen Thorax aus 2D-Röntgenprojektionen (in Kooperation mit Philips Research Hamburg).

tische Segmentierung kontinuierlich verbessert und heuristische Ansätze durch robuste Algorithmen ersetzt. Ein Formmodell wird ausgehend von seiner mittleren Form, durch Variation seiner Formparameter algorithmisch an die Bilddaten angepasst. Diese Anpassung erfolgt anhand eines Ähnlichkeitsmaßes zwischen der im Modell gespeicherten Bildinformation und den vorliegenden Bilddaten und ist auf den jeweils zulässigen, d.h. aus den Trainingsdaten resultierenden Formenraum der jeweiligen Struktur beschränkt.

Für den typischen Fall, dass sich die Struktur in den Bilddaten nicht vollständig über den gespeicherten Formenraum beschreiben lässt, erfolgt im Anschluss eine Feinanpassung des Formmodells. Diese wird durch Bildstörungen oder mangelnden Kontrast erschwert. Ziel ist, eine Balance zu finden zwischen der Einschränkung der Modellanpassung, die durch einen vordefinierten Formenraum gegeben ist, und einer regularisierten Deformation des Modells

1. Platz beim MICCAI 2007 Wettbewerb zur automatischen Segmentierung der Leber



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Medizinische Operationsplanung am Computermodell eines Patienten ermöglicht es, unterschiedliche Behandlungsvarianten risikolos und kostengünstig auszuprobieren und zu vergleichen. Computergestützte Planung geht durch die Verfügbarkeit von speziellen, problemangepassten Software-Assistenten weit über die Möglichkeiten einer konventionellen Planung hinaus. Effiziente Simulationen auf Basis individueller Patientenmodelle liefern bereits vor einem medizinischen Eingriff Erkenntnisse über das zu erwartende Behandlungsergebnis. Mittels modellgestützter Operationsplanung lassen sich optimale Behandlungskonzepte entwickeln.



### ABBILDUNG RECHTS

Die AG Medical Planning (im Bild Dagmar Kainmüller und Heiko Seim in London) erzielten den 1. Platz beim internationalen Wettbewerb der MICCAI 2009 zur automatischen Segmentierung des Unterkiefers aus CT Daten.



Mit Hilfe einer genauen Segmentierung lassen sich neben der Anatomie auch weitere, planungsrelevante Daten aus den Bilddaten extrahieren. Dazu zählen anatomische Landmarken, wie z.B. Gelenkzentren, anatomische und mechanische Achsen oder auch Ansatzflächen für Muskeln und Bänder für die funktionelle Planung und die biomechanische Simulation.<sup>1,9</sup>

über dessen Formenraum hinaus. Hier liegt ein Entwicklungsschwerpunkt, bei dem u.a. graphenbasierte Minimierungsverfahren zum Einsatz kommen.<sup>4,5</sup>

Selbst für radiologische Experten stellt die manuelle Segmentierung benachbarter Strukturen, deren Bildinformation aufgrund eines zu geringen Intensitätsunterschiedes schwer abzugrenzen ist, ein Problem dar. Typische Beispiele sind schmale Gelenkspalte, kontrastverstärkte Gefäße, die nah an knöchernen Strukturen verlaufen oder Organe mit vergleichbarer Röntgendichte. Diese Schwierigkeit überträgt sich auch auf automatische Segmentierungsverfahren. Im SFB 760 wird daher an Multi-Objekt-Segmentierungsverfahren geforscht,

bei denen Gelenkfreiheitsgrade separat modelliert und gelenkig gekoppelte Formmodelle benachbarter Strukturen gemeinsam an die Bilddaten angepasst werden, was eine überlappungsfreie Segmentierung unter Nutzung von räumlicher Kontextinformation ermöglicht.<sup>4,5,6</sup>

Auch 2009 erzielte die AG Medical Planning mit ihrem modellgestützten Verfahren den ersten Platz bei einem internationalen Wettbewerb zur automatischen Segmentierung des Unterkiefers aus CT-Daten (Abbildungen auf der rechten Seite). Die Ergebnisse decken sich weitgehend mit denen von radiologischen Experten.<sup>7</sup> Für die Anwendung in der dentalen Implantologie wurde das Verfahren dahingehend erweitert, dass zusätzlich zum Unterkiefer auch der Mandibulärnerv automatisch und mit hoher Genauigkeit rekonstruiert wird.<sup>7</sup>

Zur bildgestützten Diagnose und Therapieplanung werden im medizinischen Alltag statt tomografischer Verfahren oft radiografische Standardverfahren (Projektionsröntgen) eingesetzt. Dies liegt an den weitaus geringeren Kosten, der breiten Verfügbarkeit von Röntgeräten und der geringeren Dosis an ionisierender Strahlung. Aus diesem Grund werden am ZIB auch Verfahren untersucht, mit denen – unter Nutzung von statistischen 3D-Formmodellen – bereits aus einer oder wenigen Projektionsaufnahmen eine 3D-Rekonstruktion der durchleuchteten anatomischen Struktur erfolgen kann. Neben der erfolgreichen Rekonstruktion des Beckenknochens wurden aktuell auch viel versprechende Ergebnisse bei der Rekonstruktion des knöchernen Thorax erzielt (Abbildung auf der linken Seite).<sup>8</sup>

<sup>1</sup> Zachow et al.: **3D Reconstruction of Individual Anatomy from Medical Image Data: Segmentation and Geometry Processing**. ZIB-Report 07-41 (2007).

<sup>2</sup> Lamecker, Mansi, Relan, Billet, Sermesant, Ayache, Delingette: **Adaptive Tetrahedral Meshing for Personalized Cardiac Simulations**. MICCAI Workshop on Cardiovascular Interventional Imaging and Biophys. Modeling (CI2BM), pp. 149–58 (2009). <sup>3</sup> Zachow, Muigg, Hildebrandt, Doleisch, Hege: **Visual Analysis of Nasal Airflow**. IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 15(8), pp. 1407–14 (2009). <sup>4</sup> Kainmüller, Lamecker, Zachow, Hege: **An Articulated Statistical Shape Model for Accurate Hip Joint Segmentation**. IEEE Eng. in Med. and Biol. Conf. (EMBC), pp. 6345–51 (2009). <sup>5</sup> Kainmüller, Lamecker, Zachow: **Multi-object Segmentation with Coupled Deformable Models**. Annals of the British Machine Vision Assoc. (BMVA), Vol. 2009, No. 5, pp. 1–10 (2009).

<sup>6</sup> Kainmüller, Lamecker, Seim, Zachow: **Multi-object segmentation of head bones**. Contribution to MICCAI Workshop – Head and Neck Auto-Segmentation Challenge, Accepted for Publication in MIDAS Journal (2009). <sup>7</sup> Kainmüller, Lamecker, Seim, Zinser, Zachow: **Automatic Extraction of Mandibular Nerve and Bone from Cone-Beam CT Data**. MICCAI, Springer LNCS 5762, pp. 76–83 (2009). <sup>8</sup> Dworzak, Lamecker, von Berg, Klinder, Lorenz, et al: **3D Reconstruction of the Human Rib Cage from 2D Projection Images using a Statistical Shape Model**. Int. Journ. of Computer Assisted Radiology and Surgery, Springer, pp. 111–24 (2009). <sup>9</sup> Seim, Kainmüller, Heller, Zachow, Hege: **Automatic Extraction of Anatomical Landmarks from Medical Image Data: An Evaluation of Different Methods**. IEEE Int. Symp. on Biomed. Imag. (ISBI), pp. 538–41 (2009).

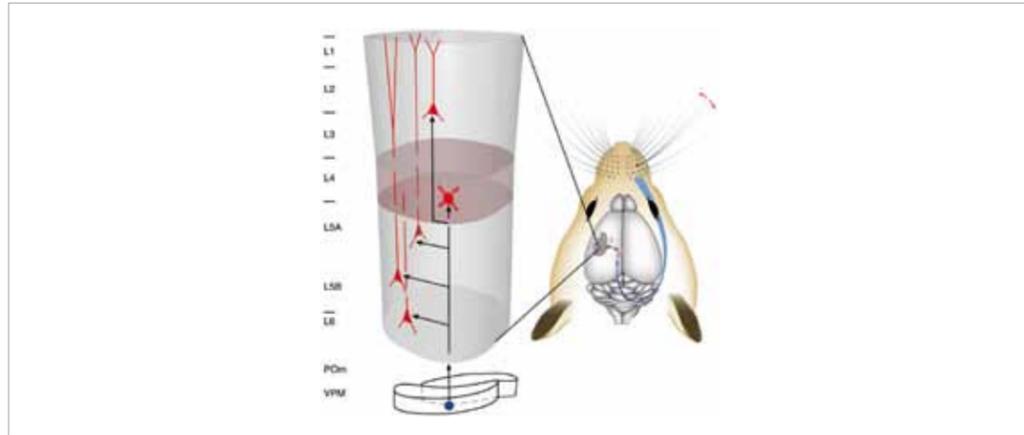
## 3D-REKONSTRUKTION VON GROSSEN NEURONALEN NETZEN

**BEARBEITET VON:** Vincent J. Dercksen, Hans-Christian Hege

**KOOPERATION:** Marcel Oberländer, Bert Sakmann (Max Planck Florida Institute, Jupiter, FL, USA), Stefan Lang (IWR, Universität Heidelberg)

**FÖRDERUNG:** Max-Planck-Institut für Neurobiologie, Martinsried

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/visual/projects/cortexinsilico](http://www.zib.de/visual/projects/cortexinsilico)



Ganz links: kortikale Säule, bestehend aus verschiedenen Schichten.  
Links: Rattenhirn mit dem Übertragungsweg (blau) der sensorischen Information von einem Barthaar zum korrespondierenden Bereich im Thalamus (2, VPM) und Kortex (3).<sup>4</sup>

Es ist eine der großen Herausforderungen der Neurobiologie, die neuronale Informationsverarbeitung zu verstehen – etwa wie sensorische Informationen empfangen und verarbeitet werden und wie daraus Verhalten entsteht. Ein häufig verwendetes Modellsystem zur Untersuchung solcher Fragen ist das sogenannte „Whisker-Barrel-System“ der Ratte. Ratten nutzen bewegliche Barthaare (whiskers) als Sinnesorgane. Diese Barthaare ermöglichen es den Tieren, sich räumlich zu orientieren und die Textur von Oberflächen zu analysieren. Zu jedem Barthaar korrespondieren eindeutig abgrenzbare Bereiche im Thalamus und Kortex, in denen die sensorische Information verarbeitet wird. „Kortikale Säule“ oder „barrel“ bezeichnet das einem Barthaar zugeordnete Neuronenaggregat im Kortex. Anhand dieses Modellsystems können Prozesse der Informationsverarbeitung von der molekularen Ebene bis hin zur Verhaltensebene erforscht werden. Durch 3D-Modellierung der zugehörigen neuronalen Schaltkreise und numerische Simulation ihrer Aktivität, erhofft man sich Erkenntnisse über Prozesse, die mit traditionellen in-vivo/in-

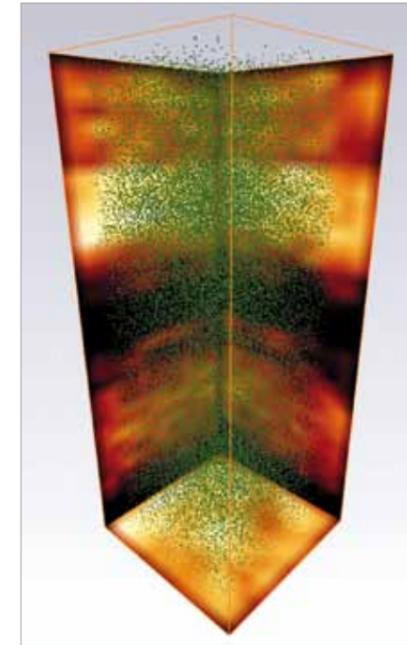
vitro Methoden nicht zu erreichen wären. Es ist unser Ziel im Verbundprojekt „cortical column in silico“, Werkzeuge für die Rekonstruktion von anatomisch realistischen neuronalen Netzen und die visuell unterstützte Analyse von Simulationsdaten zu entwickeln.

Um ein neuronales Netz zu modellieren, muss man zunächst die Anzahl der Nervenzellen im untersuchten Gehirnbereich ermitteln. Zusammen mit dem MPI haben wir eine automatische Methode entwickelt, die gefärbte Zellkörper (Somata) in 3D-Bildern detektiert und zählt.<sup>1</sup> Das Verfahren funktioniert für NeuN-gefärbte Somata in der Konfokalmikroskopie wie auch für Ca<sup>2+</sup>-gefärbte Somata in der 2-Photonenmikroskopie.<sup>2</sup> Das Verfahren nutzt Bildfilter zur Separation der Somata vom Hintergrund, eine Wasserscheidenmethode zur Trennung benachbarter, im Bild verbundener Somata und eine statistisch basierte Zerlegung der Cluster, die immer noch verbunden sind. Das vollautomatische Verfahren liefert mit manueller Zählung vergleichbare Ergebnisse und bietet erstmals die Möglichkeit Gehirnvolumi-

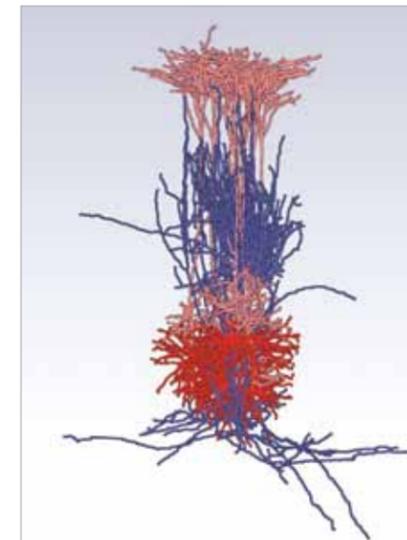


**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Wie arbeitet das Gehirn? Wie schaffen es Verbände von Nervenzellen Lernen, Denken und Handeln hervorzubringen? Die Neurobiologie versucht Antworten auf diese Fragen zu finden, indem sie die Funktionsweise natürlicher neuronaler Netzwerke analysiert. Ein Forschungsansatz ist, anatomisch und elektrophysiologisch realistische Modelle neuronaler Netze zu erstellen und deren Aktivität numerisch zu simulieren. Wir entwickeln Methoden, um neuronale Netze aus 3D-Mikroskopieaufnahmen zu rekonstruieren und den zeitlichen Verlauf ihrer Aktivität zu visualisieren.

Automatisch detektierte Neuronsomata (grün) in einer kortikalen Säule. Die Zellkörperdichte ist sehr unterschiedlich in den verschiedenen Schichten (Daten: M. Oberländer, Max Planck Florida Institute).



3D-Morphologierekonstruktionen unterschiedlicher Neurontypen: VPM-Axon (blau) und basale (rot) sowie apikale Dendriten (rosa) verschiedener L5-Zellen (Daten: M. Oberländer, Max Planck Florida Institute).



na mit zehntausenden Zellen, wie zum Beispiel das einer kortikalen Säule, vollständig auszu zählen. Um die Morphologie aller involvierten Zelltypen zu erfassen, wurde eine Verarbeitungskette entwickelt, mit der sich die Gestalt einzelner Neurone, inklusive der dünnen, weitläufigen Axone, aus Hellfeldmikroskopiedaten rekonstruieren lässt: Zunächst wird ein Gehirnbereich, in dem ein gefärbtes Neuron liegt, dünn geschnitten und mikroskopiert. Daraus entstehen dünne aber dreidimensionale Bilder. In einer visuell unterstützten 3D-Editier-Umgebung können die neuronalen Äste automatisch segmentiert, fragmentierte Linien interaktiv verbunden und Falschsegmentierungen entfernt werden; weiterhin können die Schnitte räumlich exakt ausgerichtet werden.<sup>3</sup> Im Vergleich zur herkömmlichen Rekonstruktion mit Hilfe eines software-gesteuerten Mikroskops, ermöglicht unser Verfahren objektivere Axon- und Dendritsegmentierungen. Es wird auch ein höherer Durchsatz erreicht, da die Bildverarbeitung von der Aufnahme getrennt und weitgehend parallelisierbar ist.

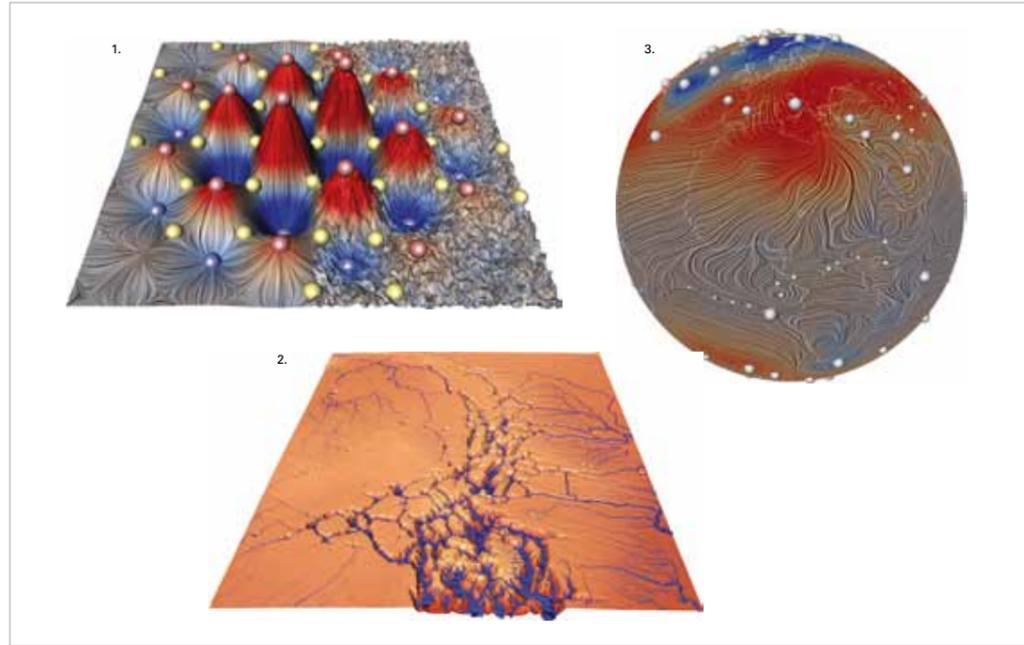
Die so rekonstruierten anatomischen Daten werden in einem Netzwerk zusammengefügt, das eine kortikale Säule im somatosensorischen Kortex der Ratte repräsentiert. Der Nachbau dieses Schaltkreises resultiert in einem zylinderförmigen Netzwerk-Modell, bestehend aus ca. 15.200 exzitatorischen kortikalen Neuronen, verbunden mit ca. 285 präsynaptischen thalamischen Neuronen. Mit einem am IWR neu entwickelten, hoch-parallelierten Simulationssystem soll die „kortikale Säule in silico“ auf Basis von gemessenen Anregungsmustern numerisch simuliert werden. Unsere Aufgabe ist nun die Entwicklung visuell unterstützter Werkzeuge zur Analyse großer neuronaler Netze in Aktion.

<sup>1</sup> Automated three-dimensional detection and counting of neuron somata, M. Oberländer, V.J. Dercksen, R. Egger, M. Gensel, B. Sakmann, H.-C. Hege, Journal of Neuroscience Methods, Vol. 180 (1), pp. 147–160, 2009. <sup>2</sup> Transmitted light brightfield mosaic microscopy for three-dimensional tracing of single neuron morphology, M. Oberländer, R. M. Bruno, B. Sakmann, and P. J. Broser. Journal of Biomedical Optics, 12(6): 1–19, 2007.

<sup>3</sup> Automatic alignment of stacks of filament data, V.J. Dercksen, B. Weber, D. Günther, M. Oberländer, S. Prohaska, H.-C. Hege, Proc. IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro, pp. 971–974, Boston, USA, 2009. <sup>4</sup> Bild aus: M. Helmstaedter, et al., Reconstruction of an average cortical column in silico. Brain Research Reviews, 55(2): 193–203, 2007.

# TOPOLOGISCHE ANALYSE DISKRETER DATEN

**BEARBEITET VON:** Jan Reininghaus, David Günther, Ingrid Hotz, Hans-Christian Hege  
**ARBEITSGRUPPEN:** Vergleichende Visualisierung, Visualisierungsalgorithmen  
**FÖRDERUNG:** DFG-Emmi-Noether Nachwuchsgruppe, DFG-SFB 557  
**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** www.zib.de/visual/projects/cvt



## ABBILDUNGEN

### 1. ROBUSTHEIT BEZ. RAUSCHENS

Ein Testdatensatz zur Illustration der robusten Berechnung von Minima (blau), Maxima (rot) und Sattelpunkten (gelb). Trotz eines heterogenen Rauschens können die dominanten Extrempunkte mit Hilfe einer kombinatorischen Analyse zuverlässig ermittelt werden.

### 2. GRABENSYSTEM MARS

Eine hoch aufgelöste Darstellung der Marsregion Noctis Labyrinthus.<sup>4</sup> Eine klassische topologische Analyse des Höhenprofils liefert eine Obermenge der Bestandteile des Grabensystems, die sehr komplex wirkt. Durch Bewertung mit Separatrixpersistenz wurde diese Menge auf die wesentlichen, hier gezeigten Strukturen reduziert. Das blaue Netzwerk, welches das zerklüftete Grabensystem repräsentiert, kann nun hinsichtlich der Verzweigungen und regelmäßigen Strukturen quantitativ charakterisiert werden.

Ziel dieses Projektes ist es, aus Daten verschiedener Anwendungen extreme Strukturen automatisch und robust zu extrahieren.<sup>1,2,3</sup> Bei eindimensionalen Daten bestehen extreme Strukturen aus Minima und Maxima. Bei zweidimensionalen Daten, wie z.B. dem Höhenprofil einer Berglandschaft, kommen noch Sattelpunkte hinzu. Des Weiteren beinhalten zweidimensionale Daten auch extreme Linien, Separatzen genannt, die die Sattelpunkte mit den Minima und Maxima verbinden. Für das Beispiel einer Berglandschaft sind diese Linien durch Bergkämme und Talsohlen gegeben. Eine computergestützte Berechnung der Extrempunkte, auch in höheren Dimensionen, ermöglicht es, große Datenmengen abstrakt zu repräsentieren, quantitativ zu analysieren und objektiv zu vergleichen.

Bisherige Methoden zur Ermittlung von Extrempunkten verwenden häufig Ableitungen. Bei verrauschten Daten ist dies problematisch, da sich die Eingangsfehler beim Differenzieren verstärken. Im vorliegenden Projekt werden daher kombinatorische Algorithmen entwickelt, die ohne Differentiation auskommen und die parameterfrei sind. Der kombinatorische Ansatz erhält automatisch topologische Invarianten, z.B. die Homologie der zugrundeliegenden Geometrie. Dieses trägt wesentlich zur Robustheit der Algorithmen bei. Zudem ermöglicht die kombinatorische Herangehensweise eine natürliche Gewichtung der Extrempunkte. Das Wichtigkeitsmaß erlaubt es, Rauschen in den Daten von ‚echten‘ Strukturen zu unterscheiden.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Bei der Analyse von Daten sind häufig bedeutungstragende Strukturen herauszufiltern. Hier gezeigte Bsp. sind Grabensysteme in Aufnahmen der Marsoberfläche und Wirbelstrukturen in meteorologischen Klimasimulationen. Wir haben eine kombinatorische Methode entwickelt, mit der solche Strukturen selbst aus stark verrauschten Daten extrahiert werden können. Eine besondere Stärke des Ansatzes besteht darin, die resultierenden Strukturen auf Basis eines Wichtigkeitsmaßes zu hierarchisieren und für eine folgende quantitative und qualitative Analyse bereitzustellen.

## 3. KLIMASIMULATION

Momentaufnahme des Windrichtungsfeldes in 10 m Bodenhöhe aus einer Klimasimulation<sup>5</sup> des Max-Planck-Instituts für Meteorologie. Die Farbgebung des Windrichtungsfeldes entspricht dem Luftdruck in Meereshöhe. Die weißen Kugeln zeigen die kritischen Punkte des Feldes, die mit einem kombinatorischen Ansatz berechnet wurden. Die Größe der Kugeln entspricht der Relevanz der Extrempunkte im Windrichtungsfeld. Daraus ergeben sich die dominanten Hoch- und Tiefdrucksysteme; weiterhin können verschiedene Wetterszenarien quantitativ verglichen werden.

## SEPARATRIXPERSISTENZ

Im Zuge des Projekts hat sich herausgestellt, dass das Wichtigkeitsmaß für Extrempunkte, im folgenden ‚Persistenz‘ genannt, für die Bewertung von Extremallinien nicht ausreicht. Die Relevanz entlang einer Extremallinie ist im Allgemeinen nicht konstant. Um die räumlich veränderliche Relevanz zu berücksichtigen, wurde die Persistenz von Punkten auf Linien erweitert. Die Persistenz eines Minimums zum Sattelpunkt ist definiert als Höhenunterschied der beiden Punkte. Betrachtet man die Bedeutung einer Separatrix, lässt sich ein ähnliches Maß für Linien motivieren: Eine Separatrix trennt immer zwei Extrempunkte, die nicht durch einen monotonen Weg verbunden werden können. Die Stärke dieser Trennung ist die Grundlage für die Definition von ‚Separatrixpersistenz‘: Sind  $m_1$  und  $m_2$  zwei Minima und  $S$  eine trennende Separatrix, so ist die Separatrixpersistenz  $\mathcal{P}_S$  eines Punktes  $x$  auf der Separationslinie durch den kleinsten Höhenunterschied des Punktes zu den beiden Minima gegeben:

$$\mathcal{P}_S(x) = \min_{m_1, m_2} (x - m_1, x - m_2)$$

Ähnlich wie Persistenz besitzt auch Separatrixpersistenz einen globalen Charakter und ist daher, im Vergleich zu lokalen Größen, ein sehr robustes Maß. Ein Beispiel ist in Abb. 2 gezeigt. Hier werden aus Fotografien der Marsoberfläche automatisch Grabensysteme ermittelt. Die berechneten Linien sind als explizite Geometrie, versehen mit einem Wichtigkeitsmaß, gegeben und bilden eine Grundlage für weitere quantitative oder qualitative Analysen. Das Verfahren hat grundlegenden Charakter und kann als Baustein in einer Vielzahl von Anwendungen verwendet werden.

## KOMBINATORISCHE VEKTORFELD-TOPOLOGIE

Die Nullstellen eines Vektorfeldes, sogenannte kritische Punkte, weisen ähnlich den Extrempunkten im Skalarfeld ein senken-, quellen-, oder sattelähnliches Verhalten auf. An die Erfolge der kombinatorischen Ansätze bei der Analyse von skalaren Feldern anknüpfend wurde eine kombinatorische Methode zur Extraktion der Extrempunkte von Vektorfeldern entwickelt. Basierend auf den theoretischen Arbeiten zur kombinatorischen Vektorfeldtopologie von Forman<sup>6</sup> erstellten wir einen algorithmischen Rahmen zur Analyse von vektoriellen Daten. Zur Bestimmung der Extrempunkte und deren Persistenz muss ein Graphenproblem gelöst werden, das sich wie folgt darstellen lässt. Sei  $G$  ein bipartiter Graph mit Kantenengewichten  $\omega$  und bezeichne  $\mathcal{M}$  die Menge aller Paarungen (matchings) in diesem Graphen, so suchen wir die Folge gewichtsmaximaler Paarungen

$$V_k = \operatorname{argmax}_{M \in \mathcal{M}, |M|=k} \omega(M)$$

Dieses Graphenproblem kann mittels der Ungarischen Methode mit einem Aufwand von  $O(n^{3/2} \log(n))$  gelöst werden, wobei  $n$  die Zahl der Knoten in  $G$  ist. Da dies für Daten aus praktischen Anwendungen zu aufwändig ist, wurde ein approximativer, parallelisierbarer Algorithmus mit einer empirischen Laufzeit von  $O(n^2 \log(n))$  entwickelt. Um die Persistenz der kritischen Punkte gut zu approximieren, war es hierbei entscheidend, dass die Konkavität der Folge  $\omega(V_k)$  in der Approximation erhalten bleibt. Unser approximativer Algorithmus ermöglicht es, große Vektorfelder, wie sie z.B. in der Klimaforschung auftreten (siehe Abb. 3) zu analysieren.

<sup>1</sup> Separatrix Persistence: Extraction of Salient Edges on Surfaces Using Topological Methods, T. Weinkauff und D. Günther, Computer Graphics Forum 28(5), pp. 1519–1528, 2009. <sup>2</sup> Combinatorial 2D Vector Field Topology and Simplification, J. Reininghaus, I. Hotz, Best Paper Award at TopoInVis 2009. Topology-based Methods in Visualization, Mathematics + Visualization, Springer, 2010. (to appear). <sup>3</sup> Fast Combinatorial Vector Field Topology, J. Reininghaus, I. Hotz, C. Loewen. (eingereicht bei Trans. Visual. Comput. Graph.). <sup>4</sup> Daten bereitgestellt vom Projekt Mars Orbiter Laser Altimeter (MOLA) der NASA

<sup>5</sup> Daten bereitgestellt vom Deutschen Klimarechenzentrum (DKRZ) <sup>6</sup> Combinatorial Differential Topology and Geometry, Forman, R. New Perspective in Geometric Combinatorics MSRI Publications, 1999, 8, pp. 177–206.

## PROJEKTE DER ABTEILUNG VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.zib.de/visual/projects/index.de.html](http://www.zib.de/visual/projects/index.de.html)

### 3D TENSORFELD-EXPLORATION

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/Tensor](http://www.zib.de/visual/projects/Tensor)

Visualization

**Bearbeitet von:** A. Kratz, N. Kettlitz, I. Hotz

**Förderung:** DFG Emmy Noether

**Inhalt:** Entwicklung von Visualisierungs- und Explorationsmethoden zur interaktiven Analyse von 3D-Tensorfeldern

### AMIRA

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/amira](http://www.zib.de/visual/projects/amira)

**Bearbeitet von:** D.Baum, S. Prohaska

**Kooperation:** Visage Imaging, Berlin; VSG Bordeaux

**Förderung:** Visage Imaging, VSG Bordeaux

**Inhalt:** Technologietransfer: Kooperation mit Software-Firmen zur Überführung neuer Algorithmen in die kommerzielle Software **Amira/Avizo**

### AMR

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/amr](http://www.zib.de/visual/projects/amr)

**Bearbeitet von:** R. Kähler, H.-C. Hege

**Kooperation:** MPI Gravitationsphysik, Golm; Kavli Institute for Particle Astrophysics and Cosmology, Stanford University

**Förderung:** MPI Gravitationsphysik

**Inhalt:** Visualisierung von Daten aus allgemein-relativistischen Simulationen, insbesondere solchen auf adaptiv verfeinerten Gittern; Entwicklung neuer Visualisierungstechniken

### BIOSPHERE3D

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/biosphere3d](http://www.zib.de/visual/projects/biosphere3d)

**Bearbeitet von:** M. Clasen,

S. Prohaska, H.-C. Hege

**Kooperation:** Lenné3D Berlin

**Inhalt:** Entwicklung eines Softwaresystems zur interaktiven Visualisierung von Landschaften mit neuen Level-of-Detail-Verfahren unter besonderer Berücksichtigung der Vegetation

### CAS

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/cas](http://www.zib.de/visual/projects/cas)

**Bearbeitet von:** J. Malinowski, A. Wittmers, D. Kainmüller, H. Lamecker, P. Deuffhard, S. Zachow

**Kooperation:** Universitätskliniken Stockholm, Wien, Berlin, Hannover, Köln

**Förderung:** Universitätsklinikum Wien

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden für die Planung komplexer Operationen in der Kopfchirurgie

### CEREBRAL ANEURYSMS

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/colorwash](http://www.zib.de/visual/projects/colorwash)

**Bearbeitet von:** C. Petz, O. Rosanwo, I. Hotz, H.-C. Hege

**Kooperation:** Charité Berlin;

Helios Klinikum Berlin

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur Anatomie-Rekonstruktion und zur Analyse von Strömungsfeldern für die patientenspezifische Analyse der Hämodynamik zerebraler Aneurysmen

### CORTEX IN SILICO

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/cortexinsilico](http://www.zib.de/visual/projects/cortexinsilico)

**Bearbeitet von:** V. Dercksen, M. Gensel, H.-C. Hege

**Kooperation:** MPI Florida; MPI Neurobiologie Martinsried; Uni Heidelberg

**Förderung:** MPI Neurobiologie

Martinsried

**Inhalt:** Entwicklung von Verfahren zur Rekonstruktion und Visualisierung des neuronalen Netzwerks einer kortikalen Säule

### CRYOREC

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/cryorec](http://www.zib.de/visual/projects/cryorec)

**Bearbeitet von:** D. Günther, H.-C. Hege, S. Prohaska

**Kooperation:** MPI Biochemie Martinsried; Uni Saarland

**Förderung:** MPI Biochemie Martinsried

**Inhalt:** Entwicklung von Verfahren zur bildbasierten Rekonstruktion von biologischen, subzellulären Strukturen in Cryo-ET-Aufnahmen

### CVT

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/cvt](http://www.zib.de/visual/projects/cvt)

**Bearbeitet von:** J.Reininghaus, C. Löwen, I. Hotz

**Förderung:** DFG Emmy Noether

**Inhalt:** Entwicklung von numerisch stabilen Verfahren zur Analyse und zum Vergleich von Vektorfeldern unter Nutzung der kombinatorischen Vektorfeld-Topologie

### EU FP6: DESSOS

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/dessos](http://www.zib.de/visual/projects/dessos)

**Bearbeitet von:** H. Seim, S. Zachow, H.-C. Hege

**Kooperation:** Universitäten Southampton HU Berlin, Leiden, Zaragoza; ESI Group;

Finsbury Orthopaedics; Pera Innovation; DePuy International

**Förderung:** EU FP6

**Inhalt:** Entwicklung bildbasierter Planungssoftware für die orthopädische Chirurgie

### DIGINEURO

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/DigiNeuro](http://www.zib.de/visual/projects/DigiNeuro)

**Bearbeitet von:** A. Kuß, M. Gensel, H.-C. Hege

**Kooperation:** MPI Neurobiologie

Martinsried; Universitäten FU Berlin, Arizona State, Marburg

**Förderung:** MPI Neurobiologie Martinsried, DFG

**Inhalt:** Entwicklung von Verfahren zum Erzeugen, Aktualisieren und Visualisieren von digitalen Gehirnatlantent und der Integration von semantischer Information

### ECHOBETONVIZ

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/EchoBetonViz](http://www.zib.de/visual/projects/EchoBetonViz)

**Bearbeitet von:** O. Paetsch, S. Prohaska

**Kooperation:** BAM Berlin

**Förderung:** BAM Berlin

**Inhalt:** Adaption von Visualisierungsverfahren zur Analyse von Echomessungen an Betonbauteilen

### SFB 557: FLOW ANALYSIS II

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/flowanalysis2](http://www.zib.de/visual/projects/flowanalysis2)

**Bearbeitet von:** J. Kasten, T. Weinkauf, I. Hotz, H.-C. Hege

**Kooperation:** Uni Magdeburg, TU Berlin, SFB 557

**Förderung:** DFG SFB 557

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur merkmalsbasierten Analyse und zum Vergleich von Strukturen in parameterabhängigen, insbesondere aktuierten Strömungen

### GLYPH PLACEMENT

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/Anisotropic](http://www.zib.de/visual/projects/Anisotropic)

Sampling

**Bearbeitet von:** A. Kratz, N. Kettlitz, I. Hotz

**Kooperation:** IDAV, University of California Davis

**Förderung:** DFG Emmy Noether

**Inhalt:** Verfahren zur Erzeugung von Punktverteilungen für die glyphbasierte Tensorfeldvisualisierung und Texturgenerierung

### KML

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/kml](http://www.zib.de/visual/projects/kml)

**Bearbeitet von:** C. Petz, S. Prohaska

**Kooperation:** Planetarium Hamburg;

DKRZ Hamburg

**Förderung:** Planetarium Hamburg

**Inhalt:** KML-Export zeitabhängiger Klimasimulationsdaten zur Präsentation von Ergebnissen der Klimaforschung

### MATHEON-F2:

#### ATLASBASIERTE 3D SEGMENTIERUNG

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/seg3d](http://www.zib.de/visual/projects/seg3d)

**Bearbeitet von:** H. Lamecker, B. Weber, H.-C. Hege, P. Deuffhard

**Kooperation:** Charité Berlin; AO Foundation Schweiz; Visage Imaging, Berlin; MATHEON Projekte F1, F4, F5, A1, A2

**Förderung:** DFG MATHEON

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur automatischen und modell-basierten Segmentierung in medizinischen Bilddaten, insbesondere für die Anatomie-Rekonstruktion

### MICROTUBULES

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/microtubules](http://www.zib.de/visual/projects/microtubules)

**Bearbeitet von:** B. Weber, S. Prohaska, H.-C. Hege

**Kooperation:** MPI molekulare Zellbiologie und Genetik

**Förderung:** MPI molekulare Zellbiologie und Genetik, Dresden

**Inhalt:** Entwicklung von automatischen Verfahren zur Identifikation von subzellulären Strukturen, insbesondere von Mikrotubuli in Elektronentomogrammen

### NOSE

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/nose](http://www.zib.de/visual/projects/nose)

**Bearbeitet von:** B. Woelk, S. Zachow

**Kooperation:** Asklepios Klinik Birkenwerder; CFX Berlin, Klinikum Karlsruhe

**Förderung:** Klinikum Karlsruhe,

Asklepios Klinik Birkenwerder

**Inhalt:** Entwicklung von Verfahren zur computergestützten Planung in der HNO-Chirurgie unter Berücksichtigung der optimalen Nasenatmung

### PERGAMON

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/pergamon](http://www.zib.de/visual/projects/pergamon)

**Bearbeitet von:** M. Clasen, O. Rosanwo, S. Prohaska, H.-C. Hege

**Kooperation:** FU Berlin; Pergamonmuseum, Berlin; DAI Berlin; TU Cottbus; Uni Köln;

Lenné3D Berlin

**Förderung:** BMBF

**Inhalt:** Virtuelle Rekonstruktion des antiken Pergamon und Kontextualisierung von Skulpturen

### PROVENANCE

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/provenance](http://www.zib.de/visual/projects/provenance)

**Bearbeitet von:** B. Meyer, S. Prohaska, H.-C. Hege

**Inhalt:** Visualisierung von Datenherkunft zur Unterstützung von komplexen visuellen Datenanalysen

### MATHEON-F7: QM MOL

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/molqm](http://www.zib.de/visual/projects/molqm)

**Bearbeitet von:** F. Marquardt, M. Koppitz, C. Lasser, H.-C. Hege

**Kooperation:** FU Berlin

**Förderung:** DFG MATHEON; FU Berlin CSS

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur Visualisierung quantenmechanischer Prozesse in Molekülen

### PORE SPACE

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/porespace](http://www.zib.de/visual/projects/porespace)

**Bearbeitet von:** U. Homberg, S. Prohaska

**Kooperation:** BAM Berlin; Uni Weimar;

FH Leipzig

**Förderung:** BAM Berlin

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur bildbasierten Analyse von Gefüge- und Porenstrukturen

### SFB 760: SIBILL

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/sfb760](http://www.zib.de/visual/projects/sfb760)

**Bearbeitet von:** D. Kainmüller,

H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege

**Kooperation:** Charité Berlin; FU Berlin

**Förderung:** DFG SFB 760

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur bildbasierten, patientenspezifischen Rekonstruktion der Anatomie des Beins für Biomechanik-Simulationen

### TENSORFELD-SEGMENTIERUNG

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/Tensor](http://www.zib.de/visual/projects/Tensor)

Segmentation

**Bearbeitet von:** C. Auer, V. Zobel, I. Hotz

**Kooperation:** IDAV,

University of California Davis

**Förderung:** DFG Emmy Noether

**Inhalt:** Entwicklung von topologischen Methoden zur Segmentierung von Tensorfeldern

### UNCERTAINTY-VIS

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/uncertainty](http://www.zib.de/visual/projects/uncertainty)

**Bearbeitet von:** K. Pöthkow, H.-C. Hege

**Kooperation:** U Magdeburg

**Inhalt:** Entwicklung von Methoden zur Extraktion und Visualisierung von unscharfen Merkmalen in fehlerbehafteten Daten, insbesondere in Skalar-, Vektor- und Tensorfeldern

### EU FP6: VIRTUE

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/virtue](http://www.zib.de/visual/projects/virtue)

**Bearbeitet von:** C. Petz, S. Prohaska, H.-C. Hege

**Kooperation:** HSVA Hamburg; Principia,

La Ciotat, Frankreich; Uni Strathclyde, UK;

FRIEND-SHIP Systems, Potsdam

**Förderung:** EU FP6

**Inhalt:** Visualisierung und Analyse von Strömungsdaten der Schiffshydro-dynamik

### 3D FROM X-RAY

**URL:** [www.zib.de/visual/projects/x-ray-3d](http://www.zib.de/visual/projects/x-ray-3d)

**Bearbeitet von:** J. Dworzak, H. Lamecker,

S. Zachow, H.-C. Hege

**Kooperation:** Philips Hamburg

**Inhalt:** Entwicklung von Verfahren zur atlasbasierten 3D-Rekonstruktion des Thorax aus 2D-Röntgenbildern

**ABTEILUNG**

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG  
VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE



**OPTIMIERUNG**

WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION  
PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME  
SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE

# OPTIMIERUNG

LEITUNG: Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Martin Grötschel, Dr. habil. Ralf Borndörfer  
WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Optimization](http://www.zib.de/Optimization)

## MISSION

Auf dem Gebiet der Optimierung sind in den letzten Jahren enorme Fortschritte erzielt worden. Wir können heute Probleme in Dimensionen lösen, die noch vor kurzem undenkbar waren. Als besonders erfolgreich erweist sich die Verwendung von allgemeinen Lösungs-Frameworks, durch die sich Erkenntnisse für einzelne Probleme unmittelbar für andere Fragestellungen nutzen lassen. Die Abteilung Optimierung treibt diese Entwicklungen auf den Gebieten der kombinatorischen, linearen und nicht-linearen, gemischt-ganzzahligen und der Constraint-Optimierung mit voran. Hierdurch eröffnen sich neue Perspektiven in den Anwendungen.

## STRUKTUR

Die Abteilung wurde von Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Martin Grötschel geleitet. Sie bestand im Jahr 2009 aus den drei Arbeitsgruppen:

- **Verkehr und Logistik** (Ltg. Dr. habil. Ralf Borndörfer, gleichzeitig stellv. Abteilungsltg.)
- **Lineare und nichtlineare ganzzahlige Optimierung** (Ltg. Dr. Thorsten Koch)
- **Telekommunikation** (Ltg. Dr. Maren Martens).

## SPIN-OFFS

Aus der Abteilung sind bisher drei Spin-off-Firmen hervorgegangen, die in den Sparten Logistik, Verkehr und Telekommunikation in Forschungsprojekten entwickelte Methoden mit großem Erfolg in Beratungsprojekten und als Basis von Softwareprodukten einsetzen. Wenn die Spin-off-Firmen auf neue mathematische Fragestellungen stoßen, entstehen häufig interessante Kooperationen. Drei Forschungsprojekte der Berichtsperiode haben auf diese Art begonnen.



Tobias Achterberg (Mitte) gewinnt den Beale-Orchard-Hays-Preis 2009 der Mathematical Programming Society für seine Arbeiten zum CIP-Löser SCIP. Das Bild zeigt ihn nach der Preisverleihung beim 20. International Symposium on Mathematical Programming in Chicago neben dem Vorsitzenden des Preiskomitees Nick Sahinidis (links) und dem Vorsitzenden der Mathematical Programming Society Steve Wright (rechts).

## AUSZEICHNUNGEN UND RUF

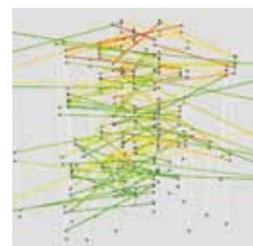
Ein Highlight des letzten Jahres war die Verleihung des Beale-Orchard-Hays-Preises for Excellence in Computational Mathematical Programming, einem der renommiertesten Preise auf dem Gebiet der Optimierung, an Tobias Achterberg für die Entwicklung des Frameworks SCIP zur Lösung gemischt-ganzzahliger Constraint Programme. Er hat dafür auch den Dissertationspreis 2009 der Association of European Operational Research Societies und den 2. Tucker Preis der Mathematical Programming Society erhalten. Stefan Heinz, Thomas Schlechte und Jonas Schweiger errangen den 1. Platz in der AIMMS-CPLEX/MOPTA Optimization Modeling Competition 2009, Markus Reuther den Diplomarbeitspreis 2009 der Gesellschaft für Operations Research, und Olga Heismann den 3. Preis der International Mathematics Competition for University Students 2009. Andreas Bley nahm einen Ruf auf eine MATHEON-Nachwuchsgruppenleiterstelle an, M. Grötschel wurde SIAM Fellow.

## VERKEHR UND LOGISTIK

Die mathematische Basis der AG sind auf der Bündelmethode basierende Verfahren zur Lösung großer gekoppelter ganzzahliger Pro-



Die MOPTA-Gewinner.



Ort-Zeitdiagramm eines Flugplans; die Färbung kennzeichnet die Verspätungswahrscheinlichkeit (rot: Verspätung wahrscheinlich, grün: Verspätung unwahrscheinlich).



Glasfaser-Telekommunikationsnetz in Berlin-Lichterfelde.

gramme in Verbindung mit neuartigen Konfigurationsmethoden, die eine Behandlung komplexer Nebenbedingungen mit Hilfe von erweiterten Formulierungen erlauben. Ein Arbeitsschwerpunkt lag auf der Untersuchung von Themen der adaptiven Diskretisierung von Modellen, die einen Anknüpfungspunkt zur Abteilung NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELIERUNG bilden. Erfolge konnten wir hierbei mit einer Studie zur Optimierung des Simplontunnels und in ersten ICE-Umlaufplanungen für die DB Fernverkehr AG erzielen. Einen zweiten Schwerpunkt bildet die Untersuchung von Unsicherheit. Dort haben wir Approximationsmethoden zur Lösung von robusten Optimierungsproblemen und von Markov-Entscheidungsproblemen entwickelt, die z.B. zur Flugzeugumlaufplanung und Aufzugsteuerung eingesetzt werden.

## LINEARE UND NICHTLINEARE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG

Das Kernthema der AG ist die Integration von Techniken der ganzzahligen Optimierung (z.B. Schrittabenverfahren, Primalheuristiken) und der Constraint-Programmierung (z.B. Domainpropagierung, Konfliktanalyse), die im Framework SCIP implementiert und in vielen Anwendungsprojekten eingesetzt werden. Das von der AG entworfene Paradigma der Constraint-ganzzahligen Programmierung wurde im Jahr 2009 erfolgreich auf die Lösung von Problemen mit kontinuierlichen Nichtlinearitäten erweitert. Eine besondere Herausforderung liegt dabei in der globalen Optimierung unter nichtkonvexen Nebenbedingungen. Weitere Schwerpunkte waren das Projekt *Exakte Ganzzahlige Programmierung*, in dem die Optimierung unter exakter Arithmetik erforscht wird, die polyedertheoretische Untersuchung kardinalitätsbeschränkter Matroide und der Entwurf

von effizienten Technologien zur massiven Parallelisierung von Baumsuch-Algorithmien. Mit den dabei implementierten Verfahren konnten auf den von der Abteilung HIGH PERFORMANCE COMPUTING betriebenen Höchstleistungsrechnern zwei bislang offene Instanzen der **MIPLIB 2003**<sup>1</sup> gelöst werden.

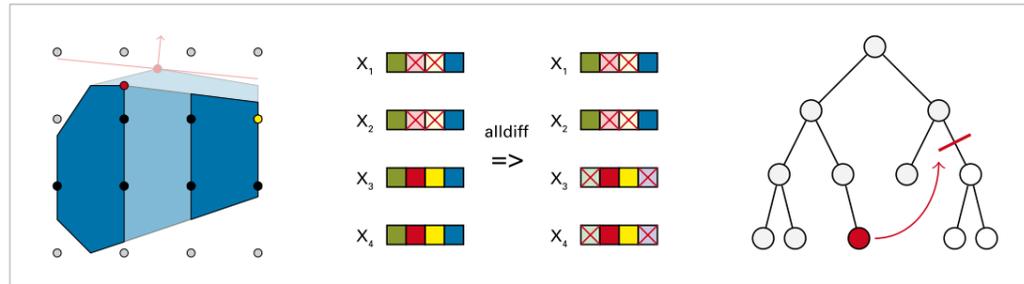
## TELEKOMMUNIKATION

Im Mittelpunkt der mathematischen Forschung der AG stehen Techniken der gemischt-ganzzahligen Programmierung zur Lösung von Netzwerkdesignproblemen, wobei Schrittabenverfahren und Dekompositionsansätze eine zentrale Rolle spielen. Diese Arbeiten sind auch über die Telekommunikation hinaus von Bedeutung; so wurde 2009 ein auf der Erkennung von Netzwerkstrukturen basierender Separierer in den IP-Lösern **SCIP** und **CPLEX** implementiert. Neue Aspekte unserer methodischen Arbeit sind die Behandlung von Unsicherheiten über den Bedarf an Bandbreite schon bei der Netzdimensionierung sowie die schrittweise Ausbauplanung von Telekommunikationsnetzen über aufeinanderfolgende Zeiträume hinweg. In diesem Zusammenhang adaptieren und entwickeln wir im Gedankenaustausch mit der AG VERKEHR UND LOGISTIK Techniken der robusten sowie (mehrstufigen) stochastischen Optimierung in Kombination mit Ganzzahligkeitsbedingungen. Mit diesen Ansätzen behandeln wir in den Projekten Fragen der Verknüpfung mehrerer Netzwerkschichten und Technologien.

<sup>1</sup> siehe <http://miplib.zib.de>

## ZIB OPTIMIZATION SUITE

BEARBEITET VON: Timo Berthold, Ambros M. Gleixner, Martin Grötschel, Stefan Heinz, Thorsten Koch, Kati Wolter  
WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP)



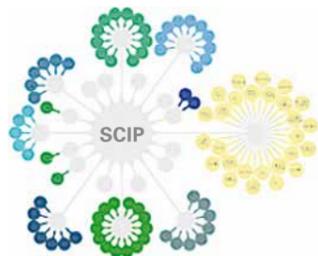
Die ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei denen bestmögliche diskrete Entscheidungen getroffen werden. Zum Beispiel kann eine UMTS-Antenne entweder aufgestellt werden oder nicht, eine Firma kann fünf oder sechs, aber keine 5,2 Beschäftigte einsetzen, Buslinien sollen immer in bestimmten Takten verkehren. Zunehmender Konkurrenz- und Rationalisierungsdruck verstärken das Interesse der Industrie an der Optimierung solcher Entscheidungen und Prozesse, insbesondere in den Bereichen Telekommunikation, Logistik und Verkehr. **SCIP** vereint MIP-, CP- und SAT-Techniken.

Derartige Praxisprobleme lassen sich als lineare gemischt-ganzzahlige Programme (Mixed Integer Programs, MIPs) formulieren. Das Ziel der AG LINEARE UND NICHTLINEARE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG ist es, als MIP modellierte Fragestellungen aus einer Bandbreite von Industrieanwendungen so weit wie möglich mittels eines allgemeinen, von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus zu lösen. Dabei interessieren uns globale Optima bzw. Lösungen mit kleiner Optimalitätslücke.

In den letzten 15 Jahren wurden auf dem Gebiet der linearen gemischt-ganzzahligen Optimierung enorme Fortschritte erzielt. Nach wie

vor gibt es aber viele Anwendungen, die Aspekte enthalten, welche mit den derzeitigen Werkzeugen nur schwer bearbeitet werden können. Dazu zählen insbesondere Probleme, die sich nur schlecht linear modellieren lassen. Hier hat sich die nichtlineare gemischt-ganzzahlige Optimierung (Mixed Integer Nonlinear Programming, MINLP) zu einem sehr aktiven Forschungsgebiet entwickelt. Aufbauend auf den Erfolgen der linearen gemischt-ganzzahligen und der globalen nichtlinearen Optimierung untersuchen wir deshalb Methoden, mit denen auch MINLPs effizient gelöst werden können.

Unsere Forschungsergebnisse fließen direkt in das Softwarepaket ZIB Optimization Suite ein. Es unterstützt den kompletten Optimierungszyklus von der Modellierung eines Praxisproblems per Zimpl bis hin zur Lösung der erzeugten Programme mit Hilfe von **SCIP** und **SoPlex**.<sup>1</sup>



### ABBILDUNG

#### LINKS

MIP basiert auf dem Lösen der LP-Relaxierung von Teilproblemen, die durch Schnittebenen verstärkt werden.

#### MITTE

Domain-Propagierung für CPs leitet aus reduzierten Wertebereichen weitere Einschränkungen ab.

#### RECHTS

Die Stärke des SAT-Lösens liegt in der Analyse von Konflikten, die sich aus Branching-Entscheidungen ergeben.

Die neue ZIB Optimization Suite 1.2 umfasst SCIP 1.2.0, SoPlex 1.4.2 und Zimpl 3.0.0 (<http://zibopt.zib.de>).

SCIP vereint MIP-, CP- und SAT-Techniken.

Durch ein Plugin-Konzept besitzt SCIP eine modulare Struktur, welche um eigene Algorithmen individuell erweitert werden kann.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Im Mittelpunkt steht die Weiterentwicklung von Algorithmen zur effizienten Lösung linearer und nichtlinearer gemischt-ganzzahliger Programme, welche in vielfältigen Industrieanwendungen auftreten. Das Softwarepaket ZIB Optimization Suite vereint die im Projekt erzielten Forschungsergebnisse. Das Herzstück bildet SCIP, zur Zeit der schnellste nichtkommerzielle Löser für lineare gemischt-ganzzahlige Programme. Unterstützt wird diese ausgereifte Software von SoPlex, einem Tool zur Lösung linearer Programme. Abgerundet durch die Modellierungssprache Zimpl bildet das Softwarepaket eine ideale Grundlage für anspruchsvolle Forschung und Lehre.

SCIP 1.2.0 wurde im September 2009 veröffentlicht und seitdem über 2000 mal heruntergeladen (<http://scip.zib.de>). SCIP befindet sich auch im kommerziellen Einsatz.

SCIP-Team gewinnt Pseudo-Boolean-Wettbewerb 2009 in 3 von 4 Kategorien (<http://cril.univ-artois.fr/PB09>).

### SCIP

Gemischt-ganzzahlige Programme (MIPs), Constraint-Programme (CPs) und Erfüllbarkeitsprobleme (Satisfiability problems, SAT) lassen sich durch das gleiche Grundverfahren lösen: Man zerlegt die Problem Instanz sukzessive in kleinere Teilprobleme, bis diese auf einfache Weise zu lösen sind. Zur Beschleunigung des Lösungsprozesses wird dieses Grundverfahren für MIPs, CPs und SAT-Probleme jeweils durch sehr unterschiedliche Techniken ergänzt.

Das Ziel der von uns eingeführten Constraint-ganzzahligen Programme (Constraint Integer Programs, CIPs) ist die Vereinigung von MIP-, CP- und SAT-Konzepten. Dieser Ansatz profitiert von der Modellierungsfreiheit der Constraint-Programmierung und von den effizienten, auf speziellere Strukturen abgestimmten MIP- und SAT-Lösungstechniken.

Die zugehörige Software **SCIP** (Solving Constraint Integer Programs) ermöglicht zwei Anwendungsarten: Zum einen kann sie als Branch-and-Cut-and-Price-Framework zur Entwicklung problemspezifischer Codes eingesetzt werden. Zum anderen ist sie durch die bereits integrierten Standard-Plugins der derzeit schnellste nichtkommerzielle MIP-Löser.

Im Berichtsjahr wurde die Performance von **SCIP** weiter gesteigert. Beigetragen haben dazu neue Heuristiken (ausgereifte LP-Rundeheuristik und Starheuristik vor dem Wurzelknoten), Verfeinerungen der Hybrid-Branching-Regel [1], neue Preprocessing-Techniken, sowie diverse Verbesserungen in den wichtigsten LP-Interfaces.

Auch die Funktionalität wurde ausgebaut. So unterstützt die Software nun Indikator-

Bedingungen und zwei neue LP-Löser. Bereitgestellt wird außerdem die Möglichkeit zur Berechnung lexikographisch minimaler Simplex-Basen, ein Feature, das die Generierung effektiverer Schnittebenen befördern soll. Die sehr oft eingesetzte Pricing-Funktion von **SCIP** wurde um die Handhabung von impliziten Variablenschranken und die Möglichkeit der vorzeitigen Terminierung erweitert.

Zusätzlich wurden im Rahmen einer Kooperation mit IBM grundlegende Verbesserungen in der Erkennung und Ausnutzung von Mehrgüterfluss-Strukturen in MIPs erzielt [2].

Um die Bandbreite der Anwendungen zu erhöhen, für die **SCIP** eingesetzt werden kann, haben wir im Berichtsjahr außerdem unsere Forschungsgebiete erweitert.

Dazu zählen unter anderem generische Spaltengenerierung, exakte ganzzahlige Optimierung, Parallelisierung auf Distributed-Memory-Systemen, Zählen von Lösungen [8], nichtlineare Pseudo-Boolean-Optimierung [5] und nichtlineare gemischt-ganzzahlige Optimierung (MINLP).<sup>2</sup>

In der nichtlinearen Optimierung haben wir uns auf die Klasse der gemischt-ganzzahligen quadratisch-restringierten Optimierungsprobleme (Mixed Integer Quadratically Constrained Programs, MIQCPs) konzentriert.

MIQCPs sind insbesondere für die Optimierung von Gastransportnetzen bedeutend. Daher ermöglicht die neue **SCIP**-Version die Behandlung quadratischer und Second-Order-Cone-Nebenbedingungen [6]. Um auch nichtkonvexe quadratische Bedingungen behandeln zu können, kann **SCIP** außerdem auf

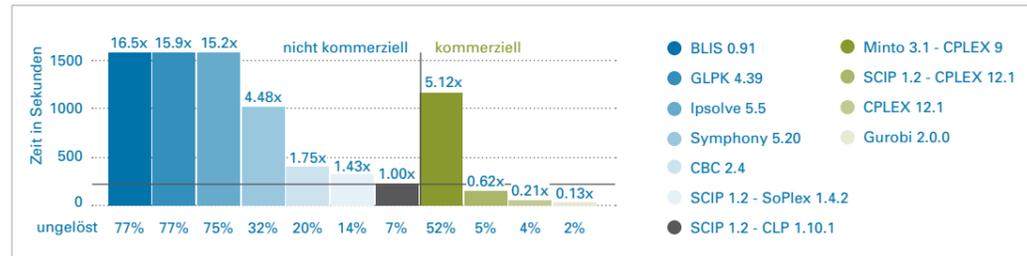


### <sup>1</sup> KOOPERATIONEN:

Georgia Institute of Technology (USA), Humboldt-Universität zu Berlin, Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Technische Universität Darmstadt, Tokyo University of Agriculture and Technology (Japan), Universidad de Chile, University of Melbourne (Australien), IBM Deutschland R&D GmbH, Siemens AG (Corporate Technology, Software & Engineering)

### <sup>2</sup> LITERATUR ZU SCIP:

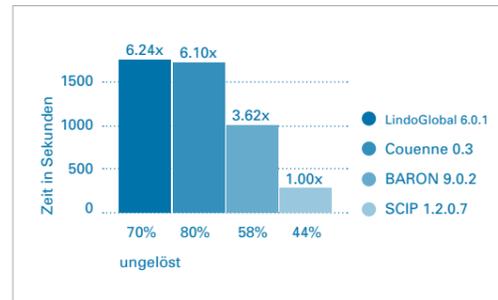
1. T. Achterberg and T. Berthold. **Hybrid branching**. In CPAIOR 2009, volume 5547 of Lecture Notes in Computer Science, pp. 309–311. Springer, 2009.  
2. T. Achterberg and C. Raack. **The MCF-separator – detecting and exploiting multi-commodity flows in MIPs**. ZIB-Report 09-38 (submitted to Mathematical Programming Computation), 2009.  
3. T. Berthold. **RENS - Relaxation Enforced Neighborhood Search**. ZIB-Report 07-28, 2007.  
4. T. Berthold and A. M. Gleixner. **Undercover – a primal heuristic for MINLP based on sub-MIPs generated by set covering**. ZIB-Report 09-40, 2009.  
5. T. Berthold, S. Heinz, and M. E. Pfetsch. **Nonlinear pseudo-boolean optimization: relaxation or propagation?** In SAT 2009, volume 5584 of Lecture Notes in Computer Science, pp. 441–446. Springer, 2009.  
6. T. Berthold, S. Heinz, and S. Vigerske. **Extending a CIP framework to solve MIQCPs**. ZIB-Report 09-23, 2009.



kontinuierlichen Variablen. Weiterhin wurden verschiedene Primalheuristiken implementiert (neue sub-MIP basierte MINLP-Heuristik [4] und Erweiterung von RENS [3] für MINLPs [6]) und die Anbindung nichtlinearer Löser ermöglicht.

Obwohl die Unterstützung von MINLPs in **SCIP** erst am Anfang steht, konnten wir an praxisrelevanten Anwendungen, u.a. Planungsproblemen im Tagebau, zeigen, dass der universelle Ansatz in **SCIP** eine mit problemspezifischen Algorithmen vergleichbare Performance erreicht [7].

Insgesamt ist **SCIP** als Teil der ZIB Optimization Suite ein leistungsstarkes Werkzeug, das bereits mit sehr großem Erfolg in unterschiedlichsten Projekten inner- wie außerhalb des ZIBs und in der Lehre eingesetzt wird.



7. A. Bley, A. M. Gleixner, T. Koch, and S. Vigerske. **Comparing MIQCP solvers to a specialised algorithm for mine production scheduling.** ZIB-Report 09-32, 2009. 8. S. Heinz and M. Sachenbacher. **Using model counting to find optimal distinguishing tests.** In CPAIOR 2009, volume 5547 of Lecture Notes in Computer Science, pp. 117–131. Springer, 2009.

**VERGLEICH**

Geometrische Mittel der Laufzeiten von gängigen MIP-Lösern. Nicht gelöste Instanzen gehen mit zwei Stunden ein (Zeitlimit).

**SoPlex** hat Nutzer in mehr als 50 Ländern und wurde im Jahr 2006 in die renommierte Benchmark-Suite SPEC CPU2006 aufgenommen. Diese wird zum Vergleich von Architekturen und Compilern von vielen großen Herstellern genutzt.

**VERGLEICH**

(Abbildung links unten) Geometrische Mittel der Laufzeiten von gängigen MINLP-Lösern auf MIPs mit quadratischen Bedingungen. Nicht gelöste Instanzen gehen mit einer Stunde ein (Zeitlimit).

**SOPLEX**

Der Lösungsansatz von **SCIP** greift, insbesondere zur Behandlung der MIP-Struktur eines Constraint-ganzzahligen Programms, wesentlich auf die Lösung Linearer Programme (LPs) zurück. Diese ergeben sich als Vereinfachung des Original-Problems, indem die Ganzzahligkeitsbedingungen an die Variablen ignoriert werden. Dazu besitzt **SCIP** Interfaces zu einer Vielzahl von kommerziellen und nicht-kommerziellen LP-Softwarepaketen.

**SoPlex** ist eine am ZIB entwickelte Implementation des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von LPs. Das Programm beinhaltet sowohl primale als auch duale Lösungsroutinen und ist als Klassenbibliothek in C++ geschrieben. Es kann als Unterroutine in anderen Programmen, wie **SCIP**, aber auch selbstständig verwendet werden.

**SoPlex** wird in Zusammenarbeit mit der TU Braunschweig und dem Industriepartner Siemens AG laufend gewartet und verbessert. Die Weiterentwicklung im Berichtszeitraum konzentrierte sich vor allem auf erhöhte Benutzerfreundlichkeit und Code-Stabilität. Im Bereich Forschung wurde die Zeilenrepräsentierung untersucht, eine **SoPlex**-Funktionalität, die von den wenigsten Simplex-Lösern bereitgestellt wird und für LPs mit sehr vielen Nebenbe-

Zimpl-Modell und MPS-Datei für das ganzzahlige Programm

```

min 2x + 3y
s.t. x + y <= 6
     x, y >= 0

var x;
var y;
minimize cost: 2 * x + 3 * y;
subto c0:      x + y <= 6;
    
```

```

NAME ex1.mps
ROWS
  N OBJECTIV
  L C0
COLUMNS
  x OBJECTIV 2
  x C0 1
  y OBJECTIV 3
  y C0 1
RHS
  RHS C0 6
ENDATA
    
```

CO@Work besuchten 106 Studenten, Doktoranden und Postdoktoranden aus 24 verschiedenen Ländern (11 Amerikaner, 17 Asiaten, 3 Australier und 75 Europäer).

**KOMMENTARE CO@WORK**

„I really appreciate this unforgettable three weeks.“  
 „This was the best course I’ve ever attended.“  
 „Well organized, I enjoyed it!“  
 „The course gave me motivation!“

dingungen signifikante Performance-Vorteile ermöglicht.

**ZIMPL**

Mit der am ZIB entwickelten Modellierungssprache **Zimpl** wird das mathematische Modell eines Problems in ein lineares oder gemischt-ganzzahliges Programm übersetzt. Das Ergebnis wird als MPS- oder LP-Datei ausgegeben und kann dann von gängigen LP- und MIP-Lösern, wie **SoPlex** und **SCIP**, eingelesen und gelöst werden. Auch in diesem Berichtsjahr wurde **Zimpl** wieder in mehreren Forschungsprojekten und Vorlesungen erfolgreich eingesetzt. Entsprechend den Anforderungen in diesen Projekten und den Bedürfnissen der Benutzer wird das Programm kontinuierlich weiterentwickelt. Insbesondere unterstützt die neueste **Zimpl**-Version die Modellierung polynomieller Nebenbedingungen.

**CO@WORK**

Am ZIB wurde 2005 die Lehrveranstaltung Combinatorial Optimization@Work ins Leben gerufen. Nachdem sie 2006 in Peking durchgeführt wurde, fand sie nun wieder in Berlin statt.

Das Ziel dieses außergewöhnlichen Blockkurses besteht darin, Studenten aus aller Welt die kombinatorische Optimierung anhand unterschiedlichster Industrieprobleme näherzubringen. Hierbei wird viel Wert auf die Anwendung des Gelernten in praxisnahen Übungen gelegt. Im Mittelpunkt stand dieses Mal die ZIB Optimization Suite, welche die Möglichkeit bietet, komplexe Probleme effizient zu modellieren und die entwickelten Modelle mit Hilfe moderner Software zu lösen. Vom 21.09.2009 bis zum 9.10.2009 trafen sich 106 Teilnehmer aus 24 Ländern in Berlin zu einem dreiwöchigen Workshop. Die Veranstaltung wurde in Zusammenar-

beit mit der TU Berlin, dem MATHEON, der Berlin Mathematical School und den Forschungszentren MASCOS (Australien) und MITACS (Kanada) unter der Federführung des ZIB organisiert und durchgeführt.

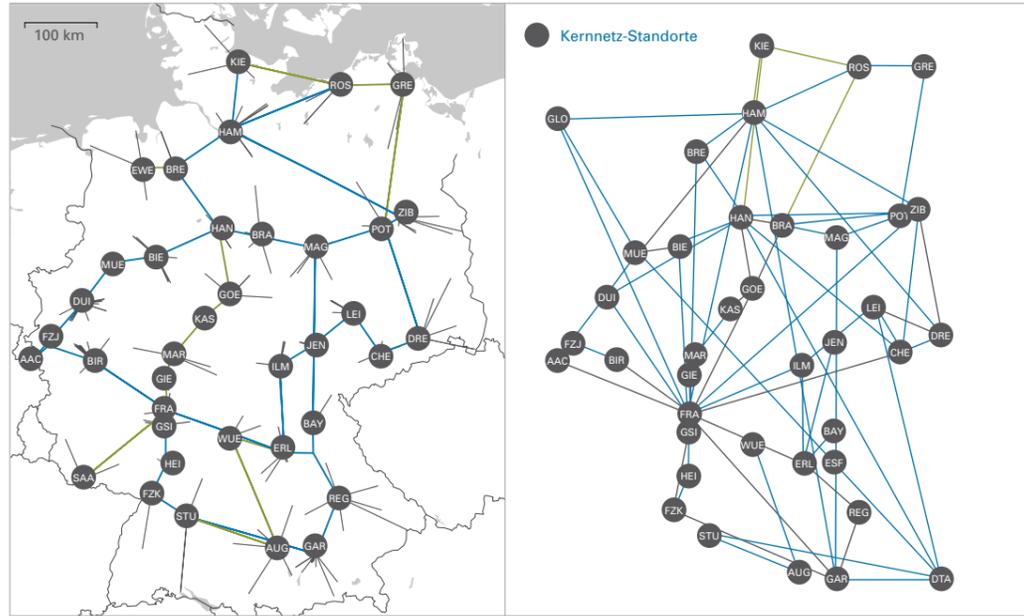
Für die Vorlesungen konnten führende Experten der jeweiligen Gebiete gewonnen werden. Nach einer Einführung in die kombinatorische Optimierung wurden unter anderem aktuelle Problemstellungen aus Logistik, Telekommunikation und Verkehr behandelt. Zu den Vortragenden gehörten Bob Bixby (USA), Martin Grötschel, Martin Puterman (Kanada) und Ted Ralphs (USA). Desweiteren nutzte die Industrie die Chance, sich dem internationalen Publikum zu präsentieren. Unter anderem stellten FICO, Gurobi, IBM, Mosek und Siemens ihre aktuellen Forschungsthemen vor. Abgerundet wurde die Veranstaltung durch Exkursionen zu Bayer Schering, dem HHLA Container Terminal, Siemens und den Verkehrsbetrieben in Potsdam.

Alle Vorlesungen wurden von der Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme aufgezeichnet. Das Vortrags- und Übungsmaterial sowie ausgewählte Videoaufzeichnungen sind online verfügbar (<http://co-at-work.zib.de/berlin2009>).



# DAS KOMMUNIKATIONSNETZ DER DEUTSCHEN WISSENSCHAFT

BEARBEITET VON: Andreas Bley,<sup>1</sup> Martin Grötschel, Thorsten Koch, Sebastian Orłowski, Christian Raack, Roland Wessäly  
WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom](http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom)



Gemeinsam mit dem MATHEON-Projekt B3 wurde ein speziell auf die Situation bei der X-WiN Planung zugeschnittener Lösungsansatz zur Netzausbauplanung entwickelt. Dabei wird zunächst heuristisch eine Menge geeigneter Lichtwege erzeugt. In einem zweiten Schritt wird dann mit Methoden der ganzzahligen Programmierung entschieden, welche dieser Lichtwege mit welcher Übertragungskapazität eingerichtet werden sollen. Die Abbildung zeigt das Trassennetz des X-WiN (links, blau: Fasern, grün: Wellenlängen) und ein berechnetes logisches Netz für ein Planungsszenario (rechts, grau: 20 Gigabit/s, blau: 10 Gigabit/s, grün: 1 Gigabit/s), Stand Sommer 2005.

Das deutsche Forschungsnetz (DFN) ist das von der Wissenschaft selbst verwaltete Hochleistungsnetz für Wissenschaft und Forschung in Deutschland. Es verbindet Hochschulen und Forschungseinrichtungen in Deutschland untereinander sowie mit den Wissenschaftsnetzen in Europa und auf anderen Kontinenten. Das X-WiN, die nunmehr fünfte Generation des nationalen Forschungsnetzes, besteht aus einer optischen Plattform aus über 6000 km Glasfaserverbindungen und zusätzlich angemieteten Wellenlängen. Mit über 500 angeschlossenen Einrichtungen und Anschlusskapazitäten von derzeit bis zu 10 Gbit/s zählt es zu den leistungsfähigsten Kommunikationsnetzen weltweit.

Bei der Planung eines solchen Netzes müssen zahlreiche Entscheidungen getroffen werden,

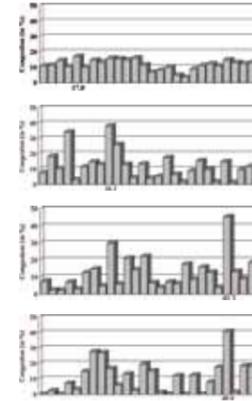
um ein funktionstüchtiges, qualitativ hochwertiges und wirtschaftliches Netz zu erhalten.

Eines der dabei untersuchten Teilprobleme ist die Netzhierarchie- und Standortplanung. Dabei ist zu entscheiden, wie viele Hierarchieebenen das Netz haben soll, wie viele und welche Kernnetzknotten eingerichtet und welche Standorte an welche Kernnetzknotten angebunden werden sollen. Ziel der Optimierung ist die Minimierung der Gesamtnetzkosten. Die Wahl der Hierarchieebenen und der Kernnetzknotten ist von außerordentlicher Bedeutung, weil diese Entscheidungen extrem langfristig sind und große Auswirkungen auf den Netzbetrieb und alle nachfolgenden Planungsschritte haben.<sup>2</sup>

In der darauf folgenden langfristigen Netzausbauplanung ist dann zu entscheiden, zwischen



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Im Projekt Optimierung des Deutschen Forschungsnetzes werden seit Jahren mathematische Modelle und effiziente Algorithmen zur Optimierung des Netzaufbaus und des Routings der Datenströme im deutschen Forschungsnetz entwickelt. Die dabei auftretenden Probleme umfassen unter anderem die Auswahl und Dimensionierung der Kernnetz-Standorte, die Planung der Glasfaser-Trassen und Lichtwege für die optische Netzplattform sowie die Kapazitäts- und Routenplanung für den Internet Dienst.



Die Abbildung oben zeigt die Auslastung der Verbindungen eines realen Netzes bei Verwendung verschiedener Routingmetriken. Für die optimierte Routingmetrik (ganz oben) ist die Auslastung wesentlich ausgeglichener und im Maximum nicht einmal halb so groß wie für die netz- und verkehrsunabhängigen Standardmetriken. Die bessere Nutzung der verfügbaren Kapazitäten führt zu einer spürbaren Verbesserung der Übertragungsqualität im Netz.

welchen Netzknoten Glasfasern gemietet und entlang welcher Wege im Glasfasernetz optische Verbindungen, sogenannte Lichtwege, geschaltet werden sollen. Prinzipiell können Lichtwege von jedem Knoten zu jedem anderen Knoten entlang eines beliebigen Weges im Glasfasernetz geschaltet werden. Dadurch sind zwischen je zwei Netzknoten zahlreiche unterschiedlich verlaufende Lichtwege möglich. Diese können zudem mit unterschiedlichen Kapazitäten betrieben werden. Je nach verwendeter Kapazität sind an den Endknoten dafür entsprechende optische Endgeräte und Router-Interfacekarten nötig. Das Ziel dieses Teils der Netzoptimierung ist die Minimierung der Kosten für gemietete Fasern, optische Endgeräte sowie Interfacekarten. Neben den unterschiedlichen Technologien und den prognostizierten Verkehrsanforderungen muss die Planung dabei auch die Ausfallsicherheit des Netzes berücksichtigen. Das logische Netz muss selbst dann noch verbunden bleiben und genügend Bandbreite vorhalten, wenn einzelne Glasfaserabschnitte oder Kernnetzknotten ausfallen. Die am ZIB entwickelten Optimierungsverfahren wurden bei der Ausschreibung des X-WiN zur wirtschaftlichen Bewertung der angebotenen Trassen genutzt und werden seit dem regelmäßig zur Planung des Netzausbaus verwendet.

Um einen qualitativ guten Betrieb des Netzes gewährleisten zu können, muss das Routing schließlich regelmäßig auf die aktuellen Verkehrsströme abgestimmt werden. In diesem „Traffic-Engineering“ genannten Schritt müssen die Routinglängen des für den Internet-Verkehr verwendeten OSPF Protokolls (Open Shortest Path First) an die Kapazitäten und Verkehrsanforderungen angepasst werden.

Dabei wird für jede Verbindung im Netz ein Längenwert festgelegt, diese Längen formen die sogenannte Routingmetrik. Die Datenströme im Netz folgen dann dem jeweils kürzesten Weg bezüglich dieser Metrik. Die Schwierigkeit bei der Optimierung solch eines Kürzeste-Wege-Routings besteht darin, dass sich die Routingwege einerseits nur indirekt über die Routingmetrik beeinflussen lassen, so dass die Wege verschiedener Verkehrsströme nicht unabhängig voneinander gewählt werden können. Mit den im Rahmen dieses Projektes entwickelten Optimierungsmethoden kann man eine Routingmetrik bestimmen, für die die maximale (relative) Auslastung der Verbindungen minimal ist. Um einen stabilen und störungsfreien Betrieb des Netzes zu gewährleisten, werden auch mögliche Ausfälle von Knoten oder Verbindungen berücksichtigt.

Die in der Praxis zu lösenden Planungsprobleme werden immer größer und komplexer. Neben den Fragen der klassischen Kapazitäts- und Routingoptimierung für IP-Netze, wie zum Beispiel der Auswahl geeigneter Routinggewichte, spielen mittlerweile auch Fragestellungen aus der Multi-Layer-Netzplanung eine entscheidende Rolle, so etwa die Einbettung der optischen Verbindungen in das Glasfasernetz. Zudem werden durch die Weiterentwicklung der Übertragungstechnologien die Grenzen zwischen Kern-, Metro- und Zugangsnetzen immer unklarer und die möglichen Netzarchitekturen immer komplexer. Dieser Entwicklung wird durch die Projekte MATHEON B3, 100GET und FTTX-Plan Rechnung getragen, welche sich der Untersuchung dieser speziellen Fragestellungen widmen.

<sup>1</sup> Die im Rahmen dieses Projektes abgeschlossene Dissertation Routing and Capacity Optimization for IP Networks von A. Bley wurde mit dem GOR Dissertationpreis 2007 und dem Dissertationpreis der INFORMS Telecommunication Section 2008 ausgezeichnet. <sup>2</sup> Das gemeinsam mit dem DFN Verein entwickelte Konzept für die redundante Anbindung von mehreren Knoten der mittleren Netzebene an verschiedene Knoten der höchsten Netzebene erlaubte gegenüber der klassischen Doppelanbindungen der einzelnen Knoten große Kosteneinsparungen. Seit 2006 unterstützt der DFN-Verein seine Nutzer auch bei der Planung und Umsetzung dieses Nachbarlösungs-Konzepts auf lokaler Ebene für die ausfallsichere und kostengünstige gemeinsame Anbindung mehrerer Einrichtungen an das Kernnetz.

## EFFIZIENTER ALPENTRANSIT DURCH DEN SIMPLONTUNNEL

BEARBEITET VON: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Thomas Schlechte, Elmar Swarat  
 WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/TrassenB](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/TrassenB)



Ein ROLA-Zug (ROLLende LAndstraße) am Simplon.  
 Bildquelle: [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:RoLa\\_Loetschberg.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:RoLa_Loetschberg.jpg)



Makromodell des Simplontunnels. Kartendaten © OpenStreetMap und Mitwirkende, CC-BY-SA.

Der *Simplontunnel* ist eine der wichtigsten Eisenbahnverbindungen in den Alpen. Seit 1905 führt die Strecke durch eine 20 km lange Doppelröhre von der schweizerischen Stadt Brig zum italienischen Ort Iselle und dann weiter nach Domodossola. Neben Personen- und Güterzügen wird die Strecke auch zum Transport von PKWs und LKWs verwendet, die auf spezielle Wagen verladen und in *Auto- bzw. ROLA-Zügen* (ROLLende LAndstraße) auf die andere Seite der Alpen befördert werden. Aufgrund der Lage des PKW-Verladebahnhofs müssen die Auto-Züge in Iselle das Gleisfeld queren, das damit eine Zeitlang für den restlichen Zugverkehr gesperrt ist. Aufgrund ihres überbreiten Profils können die ROLA-Züge Kurven im Tunnelabschnitt zwischen Iselle und Domodossola in beiden Richtungen nur auf einem Gleis durchfahren. Dies bedingt einen Slalomverkehr mit mehrmaligem Spurwechsel. Aus dem gleichen Grund besteht auf einigen Teilstrecken auch ein Begegnungsverbot für ROLA-Züge. Diese und andere Bedingungen müssen bei der Fahr- und Fahrtrassenplanung beachtet und sorgfältig aufeinander abgestimmt werden.

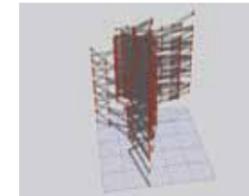
Aufgrund des dichten Verkehrs und der hohen Anforderungen an Sicherheit und Betriebsstabilität ist diese Aufgabe eine ständige Herausforderung.

Trotz Computerunterstützung ist die Fahr- und Trassenplanung bis heute Handarbeit geblieben. Das soll sich nun ändern: Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines mathematischen Optimierungsverfahrens TS-OPT zur Lösung solcher *Trassenallokationsprobleme*, um Eisenbahnen bei der Entwicklung von Betriebskonzepten und der Kapazitätsplanung zu unterstützen. Dies ist uns 2009 in einer Studie zur Berechnung der *theoretischen Kapazität* der Simplonstrecke erstmals gelungen. Untersucht wurde ein Betriebskonzept ohne Pufferzeiten, ohne Berücksichtigung von Zulaufkapazitäten in Brig und Domodossola und mit hochgerechneten Nachfragedaten. Unter diesen Bedingungen ergänzt unser Plan in optimaler Weise 63 voreingelegte Fahrtrassen durch 137 neu berechnete. Damit ist eine theoretische Kapazität von 200 Zügen pro Tag nachgewiesen. Trassenallokationsprobleme können

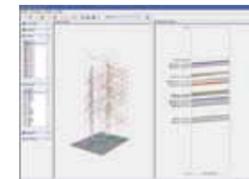
Das Projekt Trassenbörse ist ein vom Bundesministerium für Wirtschaft (BMWi) gefördertes interdisziplinäres Verbundprojekt mit den Partnern Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), TU Berlin; Institut für Volkswirtschaftslehre und Wirtschaftsrecht, Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (WIP), TU Berlin; IMP Ilgmann, Miethner & Partner Unternehmensberatung, Berlin; Institut für Verkehrswesen, Eisenbahnbau und -betrieb (IVE), Leibniz-Universität Hannover.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Hier geht es um die Berechnung konfliktfreier und effizienter Allokationen von Fahrtrassen in Eisenbahnnetzen. Diese Probleme können mathematisch als Pfadpackungsprobleme in geeigneten Planungsgraphen aufgefasst werden. Das Problem: Diese Graphen werden schnell groß. Der Schlüssel zur Lösung liegt in der problemspezifischen Hin- und Rücktransformation von Daten und Lösungen zwischen einem betrieblich korrekten mikroskopischen Netz und einem zur Optimierung verwendeten größeren makroskopischen Netz. Mit diesem Ansatz konnte 2009 erstmals eine Fahrtrassenoptimierung für 24 h Zugverkehr im Simplontunnel durchgeführt werden.



Planungsgraph zur Trassenallokation.



Das Visualisierungstool TRAVIS und die Problem-bibliothek TTPLib unter der Adresse <http://ttplib.zib.de> wurden 2009 mehr als 100 mal heruntergeladen.

mathematisch als Probleme des Packens von (den Trassen entsprechenden) Pfaden in einem zeitexpandierten, dem Eisenbahnnetz entsprechenden Planungsgraphen aufgefasst werden. Das Problem: Diese Graphen werden sehr groß. Allein auf der kurzen Strecke von Brig nach Domodossola gibt es 12 Bahnhöfe, 100 Weichen und über 200 Signale, das für die betriebliche Simulation verwendete *Mikronetz* hat 1154 Knoten und 1831 Kanten. Bei der üblichen *Zeitdiskretisierung* von 6 Sekunden wäre mit diesem Ansatz bereits an eine Optimierung der Tagesplanung nicht mehr zu denken. Ein so feiner Detaillierungsgrad ist allerdings gar nicht überall erforderlich. Große Teile des Netzes lassen sich ohne Informationsverlust zu sogenannten Fahrstraßenknoten zusammenfassen, und auch die Zeitdiskretisierung kann an den meisten Stellen vergrößert werden. Der Trick besteht also darin, aus den Mikrodaten ein geeignetes *Makronetz* zu konstruieren, in diesem die Planung durchzuführen und das Ergebnis wieder in die Mikrowelt zurückzurechnen. Ähnlich wie bei der Gitterkonstruktion für Finite-Elemente-Methoden muss diese *Mikro-Makro-Transformation* auf eine Weise erfolgen, die einerseits genügend Freiheitsgrade belässt, andererseits müssen die Ergebnisse aber auch einer anschließenden Betriebssimulation

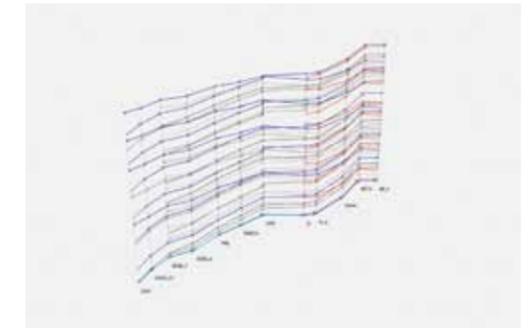
standhalten. Dies ist möglich; wir haben mit der Entwicklung einer entsprechenden Methodik begonnen und diese in einem MiMa-Transformationstool NETCAST umgesetzt.

Es bleibt noch das *Pfadpackungsproblem* im Makrographen zu lösen. Das Hauptproblem ist die Konfliktvermeidung zwischen den räumlich und zeitlich verschiebbaren Fahrtrassen. Wir haben zu diesem Zweck ein neuartiges Modell vom Typ einer *Extended Formulation* entwickelt, in dem zulässige lokale Konfigurationen von Trassen durch Variablen repräsentiert werden. Dieses Modell ist flexibler und leistungsfähiger als traditionelle, auf Schnittebenen basierende Ansätze. Es wird mit einem *Spaltenerzeugungsansatz* gelöst. Durch die Verwendung eines Bündelverfahrens und entsprechender IP-Techniken im algorithmischen Kern kann unser Tool TS-OPT große Instanzen mit hunderten von Fahrtrassen optimieren.

Neben der Betriebsplanung wie beim Simplontunnel kann TS-OPT auch bei einer Auktionierung von Fahrtrassen, wie sie als *Höchstpreisverfahren* in der deutschen Eisenbahninfrastrukturverordnung (EIBV)<sup>1</sup> zur Lösung von Streitfällen vorgesehen ist, oder in hypothetischen Szenarien einer Netzvermarktung eingesetzt werden.



Die Infrastruktur des Simplontunnels auf mikroskopischer Ebene. Rechts: Orts-Zeit-Diagramm eines Fahrplans im Makronetz.



<sup>1</sup> §9 Absatz 5 EIBV, „Höchste Summe der Regelentgelte“: Bei der Entscheidung zwischen gleichrangigen Verkehren nach Absatz 4 hat der Betreiber der Schienenwege die Entgelte für die streitigen Zugtrassen gegenüberzustellen und bei einem Konflikt zwischen zwei Zugtrassen der Zugtrasse den Vorrang einzuräumen, bei der das höchste Regelentgelt zu erzielen ist, bei einem Konflikt zwischen mehr als zwei Zugtrassen den Zugtrassen den Vorrang einzuräumen, bei denen in der Summe das höchste Regelentgelt zu erzielen ist.

## PROJEKTE DER ABTEILUNG OPTIMIERUNG

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.zib.de/Optimization/Projects/index.de.html](http://www.zib.de/Optimization/Projects/index.de.html)

### MATHEON-B3:

#### INTEGRIERTE PLANUNG VON MULTI-LAYER TELEKOMMUNIKATIONSNETZEN

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B3](http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B3)

**Mitarbeiter:** A. Bley, (-05/2009), M. Grötschel, M. Martens, S. Orłowski (-05/2009), C. Raack, R. Wessälly

**Partner:** atesio GmbH, DFN-Verein, Nokia Siemens Networks GmbH, IBM/ILOG, RWTH Aachen, Telecommunication Networks Group der TU Berlin, MATHEON-B15

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** In diesem Projekt sollen realistische Modelle und geeignete Algorithmen zur Netzplanung entwickelt und deren mathematische Struktur untersucht werden.

### MATHEON-B4:

#### PLANUNG UND KONFIGURATION DER UMTS-FUNKSCHNITTSTELLE

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B4](http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B4)

**Mitarbeiter:** A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes (-04/2009), M. Grötschel

**Partner:** atesio GmbH Berlin, EU COST Action 293: Graphs and Algorithms in Communication Networks (GRAAL), EU COST Action 2100: Pervasive Mobile & Ambient Wireless Communications, MATHEON-B7

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** In dem vorliegenden Projekt wird die Aufgabe der Funknetzplanung für UMTS, also die richtige Einstellung der Antennen, mit mathematischen Methoden gelöst.

### MATHEON-B12:

#### SYMMETRIEN IN DER GANZZAHLIGE PROGRAMMIERUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-B12](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-B12)

**Mitarbeiter:** T. Berthold, M. Grötschel

**Partner:** TU Braunschweig, U Magdeburg, Projekt Exakte ganzzahlige Programmierung, MATHEON-B14, MATHEON-B15, MATHEON-D17

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung struktureller Erkenntnisse, algorithmischer Methoden und Software, um heutige Löser ganzzahliger Optimierungsprobleme bei der Behandlung symmetrischer Problemstellungen zu verbessern.

### MATHEON-B14:

#### KOMBINATORISCHE ASPEKTE IN DER LOGISTIK

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/Matheon-B14](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/Matheon-B14)

**Mitarbeiter:** B. Hiller, M. Grötschel, T. Klug, A. Tuchscherer

**Partner:** MATHEON-B12, MATHEON-D17, TU Bayreuth, TU Kaiserslautern, Maastricht University, Volkswagen AG, Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH, Siemens AG

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** Dieses Projekt befasst sich mit Theorie und Algorithmen zur Erhöhung der Leistungsfähigkeit von Logistiksystemen.

### MATHEON-B15:

#### ANGEBOTSPLANUNG IM ÖFFENTLICHEN NAHVERKEHR

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/Matheon-B15](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/Matheon-B15)

**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, M. Grötschel, R. Möhring (TU Berlin), M. Neumann, S. Stiller (TU Berlin)

**Partner:** ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, IVU Traffic Technologies AG, Stadt Potsdam, EPN Quito, MATHEON-B3, MATHEON-B20, MATHEON-F4

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung und Verbesserung mathematischer Optimierungsmethoden zur Entscheidungsunterstützung bei der Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr.

### MATHEON-B20:

#### OPTIMIERUNG VON GASTRANSPORTNETZEN

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-B20](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-B20)

**Mitarbeiter:** T. Achterberg, T. Berthold, A. Fügenschuh, M. Grötschel, A. Gleixner, S. Heinz, R. Henrion (WIAS), T. Koch, W. Römisches (HU Berlin), S. Vigerske (HU Berlin), K. Wolter

**Partner:** MATHEON-B15, MATHEON-C7, Forschungsnetzwerk NOPT, TU Braunschweig, TU Darmstadt, HU Berlin, Siemens AG, IBM, GAMS Development

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** Das Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung leistungsfähiger Techniken in einem allgemeinen Framework zur Lösung von Optimierungsproblemen, wie sie im Gastransport und anderen Anwendungen auftreten.

### MATHEON-D17:

#### CHIP DESIGN VERIFICATION DURCH CONSTRAINT-INTEGER-PROGRAMMIERUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-D17](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-D17)

**Mitarbeiter:** T. Achterberg, S. Heinz, M. Grötschel, T. Koch

**Partner:** OneSpin Solutions, IBM/ILOG, TU Darmstadt, MATHEON-A8, MATHEON-B3, MATHEON-B12, MATHEON-B14, MATHEON-B15

**Forschungsförderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Inhalt:** Das Ziel dieses Projektes ist die Anwendung von „Property Checking“ auf einer „Register-Transfer-Ebene“, um die spezielle Struktur der verschiedenen Operationen besser bei der Chip-Verifikation ausnutzen zu können.

### EXAKTE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/ExactIP](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/ExactIP)

**Mitarbeiter:** M. Grötschel, T. Koch, K. Wolter

**Partner:** TU Braunschweig, U de Chile (Santiago de Chile), MATHEON-D17

**Forschungsförderung:** DFG-Schwerpunktprogramm 1307 „Algorithm Engineering“

**Inhalt:** Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines exakten IP-Lösers.

### ILOG/ZIB-KOOPERATION

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP)

**Mitarbeiter:** C. Raack, M. Grötschel, T. Berthold

**Partner:** IBM/ILOG

**Forschungsförderung:** IBM/ILOG

In dieser Kooperation sollen Forschungsergebnisse zur allgemeinen ganzzahligen Optimierung erzielt werden, die in den Lösern SCIP und CPLEX eingesetzt werden.

### SIEMENS/ZIB-KOOPERATION

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Siemens](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Siemens)

**Mitarbeiter:** T. Berthold, A. Gleixner, M. Grötschel, T. Koch

**Partner:** Siemens AG, TU Darmstadt

**Forschungsförderung:** Siemens AG

**Inhalt:** Die Kooperation zwischen Siemens, dem ZIB und der TU Darmstadt dient der Weiterentwicklung von LP- und IP-Lösungssoftware, insbesondere SCIP und SoPlex, unter besonderer Berücksichtigung von Anforderungen, die bei Siemens entstehen.

### KARDINALITÄTSBESCHRÄNKTE KOMBINATORISCHE OPTIMIERUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/CCCO](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/CCCO)

**Mitarbeiter:** R. Stephan

**Partner:** V. Kaibel (U Magdeburg), J.F. Maurras (U de la Méditerranée)

**Inhalt:** In diesem Projekt werden polyedrische Strukturen in Verbindung mit kardinalitätsbeschränkten kombinatorischen Optimierungsproblemen untersucht.

### PROJEKTIONEN VON DP-BASIERTEN ERWEITERTEN FORMULIERUNGEN

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/DPprojection](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/DPprojection)

**Mitarbeiter:** Rüdiger Stephan

**Inhalt:** Ziel des Projekts ist es, von einer erweiterten Formulierung von dynamischen Programmierungsproblemen durch Projektion auf Facetten des assoziierten Polyeders im Originalraum zu schließen.

### OPTIMIERUNG VON GASTRANSPORTNETZEN

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/NOPT](http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/NOPT)

**Mitarbeiter:** A. Fügenschuh, A. Gleixner, M. Grötschel, B. Hiller, T. Koch

**Partner:** TU Darmstadt, U Hannover, U Duisburg-Essen, HU Berlin, TU Braunschweig, WIAS

**Inhalt:** Das Projekt NOPT beschäftigt sich mit der Analyse und Optimierung von Gasttransportnetzen.

### 100 GET

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/100GET](http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/100GET)

**Mitarbeiter:** A. Bley (-05/2009), M. Martens, M. Grötschel

**Partner:** atesio GmbH, T-Systems Nova GmbH, Siemens AG, Alcatel Deutschland, Ericsson GmbH, MATHEON-B3, Projekt Eibone, TU München

**Forschungsförderung:** Programm EUREKA, Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi)

**Inhalt:** Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung mathematischer Modelle und Lösungsmethoden zur Optimierung von auf der 100 Gbit/s Technologie aufbauenden Core-Metro-Access-Netzen.

### WERKZEUGE ZUR PLANUNG VON FTTX-NETZEN

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/FTTX](http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/FTTX)

**Mitarbeiter:** M. Martens, A. Werner

**Partner:** atesio GmbH, Fraunhofer Institute for Telecommunications – Heinrich Hertz Institute, VPlsystems GmbH, MATHEON-B21

**Forschungsförderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

**Inhalt:** Das Vorhaben FTXX-PLAN hat zum Ziel, innovative Methoden und Werkzeuge zur modellbasierten Planung von Breitbandzugangsnetzen zu entwickeln, mit denen Analysen für die strategische Entscheidungsfindung der Netzbetreiber maßgeschneidert erzeugt werden können.

### COST SHARING

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/CostShare](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/CostShare)

**Mitarbeiter:** M. Grötschel, N.D. Hoang

**Forschungsförderung:** ZIB Stipendium

**Inhalt:** Die Fragestellung dieses Projektes ist, wie gemeinsame Kosten einer Kooperation fair auf die Mitglieder verteilt werden.

### BETRIEBSHOFMANAGEMENT

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/VPP](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/VPP)

**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, C. Cardonha, M. Grötschel

**Forschungsförderung:** Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq, Brasilien)

**Inhalt:** Dieses Projekt befasst sich mit der optimalen Zuweisung der Stellplätze für Fahrzeuge in einem Busbetriebshof, um Rangieroperationen zu minimieren und um den Kilometerstand der Fahrzeuge auszubalancieren.

### ROBUSTE FLUGZEUGUMLAUFPLANUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/LSB-rxOPT-tail](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/LSB-rxOPT-tail)

**Mitarbeiter:** I. Dovica, R. Borndörfer

**Partner:** Lufthansa Systems Berlin GmbH

**Forschungsförderung:** Lufthansa Systems Berlin GmbH

**Inhalt:** In diesem Projekt werden Methoden zur Konstruktion von verspätungsresistenten Flugzeugrotationen entwickelt.

### OPTIMIERUNG DER SYSTEMKAPAZITÄT UND ENERGIEEFFIZIENZ VON AUFZUGGRUPPEN MIT ZIELRUFSTEUERUNG

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/KollmorgenCapacity](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/KollmorgenCapacity)

**Mitarbeiter:** M. Grötschel, B. Hiller, T. Klug, A. Tuchscherer

**Partner:** Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH, MATHEON-B14

**Forschungsförderung:** Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH

**Inhalt:** In diesem Projekt werden Methoden zur Steuerung von Personenaufzügen entwickelt, die eine hohe Beförderungskapazität bei geringen Wartezeiten sowie eine gute Energieeffizienz bieten.

### FAHRZEUGUMLAUFPLANUNG IM SCHIENENPERSONENFERNVERKEHR

**URL:** [www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/VehicleRotationPlanning](http://www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/VehicleRotationPlanning)

**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, M. Reuther, S. Weider

**Partner:** DB Fernverkehr AG

**Forschungsförderung:** DB Fernverkehr AG

**Inhalt:** In diesem Projekt wird ein Fernverkehrs-Umlaufplaner VR-OPT entwickelt.

**ABTEILUNG**

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG  
VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE  
OPTIMIERUNG

 **WISSENSCHAFTLICHE  
INFORMATION**

PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME  
SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE

# WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

LEITUNG: Dr. Thorsten Koch

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/SIS](http://www.zib.de/SIS)



Die Abteilung Wissenschaftliche Information besteht aus den Arbeitsgruppen:

- **Information und Kommunikation** (Wolfgang Dalitz) (ehemals MatNet und Computeralgebra)
- **Museumsinformation** (Carlos Saro)
- **Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin Brandenburg** (KOBV)

Aufgabe der Abteilung ist es, die schnelle und vielfältige Entwicklung der Informationsgesellschaft, insbesondere in Bezug auf die Wissenschaft, zu verfolgen und zu begleiten. So verwundert es nicht, dass sich die Abteilung „Wissenschaftliche Informationssysteme“ wie auch schon im vorherigen Jahr durch einen starken Wandel auszeichnet. Dies wird sich auch 2010 fortsetzen.

Im Jahr 2009 ist Joachim Lügger, der langjährige Leiter der Abteilung, in den Ruhestand getreten und hat die Abteilung Mitte des Jahres an Dr. Thorsten Koch übergeben.

Für die Arbeitsgruppe „Information und Kommunikation“ hat sich durch die Einwerbung von Mitteln aus dem Konjunkturprogramm II die Möglichkeit ergeben, die Forschung auf die Bereiche „eLearning“ und „Multimedia“ auszuweiten. Eine bedeutende Aktivität stellte hierbei die Begleitung der Veranstaltung „Combinatorial Optimization at Work II“ dar. Hier wurden alle innerhalb der dreiwöchigen Veranstaltung gehaltenen Vorlesungen aufgezeichnet und vielfältige Erfahrungen in Bezug auf Verfahren und Probleme bei der Weiterverarbeitung gewonnen.

Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe ist nach wie vor die Arbeit im mathematischen Umfeld. Folgende Web-Server werden am ZIB gehostet und durch die Arbeitsgruppe luK betreut:

- **International Mathematical Union (IMU)**  
[www.mathunion.org](http://www.mathunion.org)
- **Mathematical Programming Society (MPS)**  
[www.mathprog.org](http://www.mathprog.org)
- **Fachgruppe „Information und Kommunikation“ der Deutschen Mathematiker-Vereinigung/Österreichischen Mathematischen Gesellschaft(DMV/ÖMG)**  
[www.zib.de/luK-DMV](http://www.zib.de/luK-DMV)
- **Math-Net – Koordinierungsstelle der Aktivitäten im luK-Bereich der Mathematik**  
[www.math-net.org](http://www.math-net.org)

Auch im Bereich „Open Access Journale“ gibt es signifikante Fortschritte. In diesem Jahr sind die ersten gedruckten Ausgaben des mitinitiierten Open Access Journals „Mathematical Programming Computation“ erschienen. Die Arbeitsgruppe „Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für Museen“ blickt ebenfalls auf ein erfolgreiches Jahr zurück, wie auf den folgenden Seiten ausführlich dargestellt wird. Im Bereich des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin Brandenburg wurde die Ausgestaltung der strategischen Allianz mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) weiter vorangetrieben. Insbesondere die bevorstehende Einführung des MARC-Datenformates führte hier zu intensiven Konsultationen, die in eine gemeinsame Arbeitsgruppe mündeten und so die Ausgestaltung gemeinsamer Strukturen vorantrieben. Allgemein wurde in der Abteilung damit begonnen, die Zusammenarbeit der Arbeitsgruppen untereinander zu intensivieren. Dies wird sich in der nächsten Berichtsperiode in übergreifenden Projekten manifestieren.



# ENTWICKLUNG INFORMATIONSTECHNISCHER WERKZEUGE FÜR MUSEEN

BEARBEITET VON: Carlos Saro, Barbara Fichtl, Beate Jahn

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/SIS/Projects/Museum](http://www.zib.de/SIS/Projects/Museum)

## SOFTWARE

Basissoftware für alle Projekte ist das ursprünglich von der britischen Museum Documentation Association (MDA, inzwischen umbenannt in Collection Trust<sup>1</sup>) speziell für den Einsatz zur Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS. Es wird seit 1981 vom ZIB weiterentwickelt und interessierten Museen zur Verfügung gestellt. GOS ermöglicht die Verarbeitung komplexer, hierarchisch gegliederter Informationsstrukturen und erlaubt dadurch die Beschreibung auch komplizierter Objektzusammenhänge ohne Informationsverlust. Im Gegensatz zu Bibliotheken sind die Objekte in Museen komplexer und heterogener und erfordern zu ihrer wissenschaftlichen Beschreibung entsprechende Datenstrukturen, um so unterschiedliche Dinge wie eine Ritterrüstung, ein Filmplakat, eine Blechdose oder eine Spielzeuglokomotive in einer einheitlichen Datenbank beschreiben und verwalten zu können.

## DATENNUTZUNG

Ein Schwerpunkt bei der Entwicklung ist die möglichst vielseitige Verwendung einmal erfasster Daten. So werden die bei der Inventarisierung der Objekte gewonnenen Daten für verschiedenste wissenschaftliche und verwaltungstechnische Vorgänge genutzt (Ausstellungsvorbereitung, Leihverkehr, Restaurierungsprotokolle, ...). Ebenso können die Daten auf unterschiedlichen Medien (Papier, CD bzw. DVD, Internet, Multimediaanwendungen in Ausstellungen) zur Verfügung gestellt werden, selbstverständlich hat dabei die Publikation von Sammlungsbeständen im Internet besondere Bedeutung: Mit der bereits seit 1996 im Internet zugänglichen Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums<sup>2</sup> zeichnet das ZIB für die technische Betreuung dieses nach wie

vor umfangreichsten Angebots seiner Art in Deutschland verantwortlich. Das Museumsprojekt unterstützt die Kooperationspartner auch bei weiteren Vorhaben, wie z.B. aktuell das Stadtgeschichtliche Museum bei einem DFG-geförderten Projekt zur Erfassung von Autographen. Da Vorhaben im Bereich der Museumsdokumentation im Allgemeinen auf größere Zeiträume ausgerichtet sind, erwarten die beteiligten Institutionen eine kontinuierliche Zusammenarbeit. So besteht zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz<sup>3</sup> bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Weitere wichtige Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum<sup>4</sup> seit 1991, dem Bayerischen Nationalmuseum in München<sup>5</sup> (seit 1995), dem Museum im Wasserwerk Friedrichshagen<sup>6</sup> (seit 1998) und dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig<sup>7</sup> (seit 2001) sowie mit einigen anderen Museen. Das Projekt finanziert sich damit weitestgehend aus Drittmitteln.



Datenblattausdruck aus der Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums. Das Datenblatt enthält alle Inhalte, die der Benutzer mit seinen Berechtigungen einsehen kann.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Das Museumsprojekt unterstützt im Rahmen von mehr als 10 Kooperationsverträgen unterschiedliche Museen bzw. museumsbetreuende Einrichtungen beim Einsatz moderner informationstechnischer Methoden bei der Sammlungsdokumentation.<sup>15</sup>

„Drehbuchausdruck“ für die Dauerausstellung des Deutschen Historischen Museums. Das Drehbuch gibt die inhaltliche Gliederung der Ausstellung wieder und wird vollständig aus der Objektdatenbank erzeugt. Es dient als wertvolles Hilfsmittel für Ausstellungsarchitekten und Kuratoren.



## STANDARDS

Der Nachhaltigkeit dient auch der zweite Schwerpunkt der Arbeit des Museumsprojekts: die Vermittlung und Verbreitung international anerkannter Standards in die deutsche Museumswelt. Durch enge Kontakte zu entscheidenden Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund<sup>8</sup> und der CIDOC (Comité international pour la documentation des International Council of Museums<sup>9</sup>), hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation gemeinsam mit dem Institut für Museumsforschung jährlich durchgeführte Herbsttagung zur Museumsdokumentation findet seit mehr als 15 Jahren traditionell am ZIB statt.

An der im Rahmen der Fachgruppe Dokumentation gegründeten Arbeitsgruppe „Datenaustausch“ nehmen Mitarbeiter des Museumsprojekts aktiv teil. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit den Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten und untersucht (Metadaten) Formate auf ihre Anwendbarkeit für die Bedürfnisse der unterschiedlichen Sammlungen. Grundlage dafür ist das von der CIDOC entwickelte objektorientierte „Conceptual Reference Model“<sup>10</sup> (CRM), welches sich als „domain

ontology“ (im informationstechnischen Sinn) versteht und 2006 als ISO-Standard ISO 21127:2006 publiziert wurde. Das 2007 von der Arbeitsgruppe publizierte Datenpublikationsformat „MuseumDat“<sup>11</sup> wird inzwischen von mehreren Museumsportalen als Standardformat genutzt. Auch Daten des Stadtgeschichtlichen Museums Leipzig und des Deutschen Historischen Museums werden in diesem Format vom ZIB an die Portale BAM<sup>12</sup> sowie an die Europäische Digitale Bibliothek europeana<sup>13</sup> geliefert.

## VOKABULARKONTROLLE

Das ZIB war maßgeblich an der Gründung der Initiative „museumsvokabular.de“<sup>14</sup> beteiligt, welche im Mai 2006 mit einer Online-Plattform ans Netz ging und auf ein breites Interesse über die Fachgruppe Dokumentation hinaus stößt. Ziel der Initiative ist die Bereitstellung, Weiterentwicklung und Angleichung von in der Museumsdokumentation verwendeten kontrollierten Vokabularen in einem gemeinsamen Portal. Zur Vereinfachung des Software-unabhängigen Einsatzes von Thesauri, Systematiken u.ä. wurde vom ZIB insbesondere die Entwicklung eines auf offenen und verbreiteten Standards basierenden WEB-Services vorgeschlagen (SKOS – Simple Knowledge Organisation System zur Datenstrukturierung, SOAP als Kommunikationsprotokoll, XML als allgemeines Datenaustauschformat). Der Service ermöglicht den plattformunabhängigen Zugriff auf Vokabulare, die von unterschiedlichen Einrichtungen und mit verschiedenen DBMS bereitgestellt werden. Nachdem vom ZIB bereits Anfang 2006 ein Prototyp auf einem Workshop vorgestellt und eine Schnittstellendefinition vorgeschlagen wurde, fand im Sommer 2007 die Abstimmung mit anderen Software-Herstellern statt. Inzwischen können fast alle namhaften Hersteller von Museums-Software den WEB-Service nutzen.

<sup>1</sup> <http://collectiontrust.org.uk> <sup>2</sup> [www.dhm.de/datenbank](http://www.dhm.de/datenbank) <sup>3</sup> <http://smb.spk-berlin.de/ifm> <sup>4</sup> [www.dhm.de](http://www.dhm.de)

<sup>5</sup> [www.bayerisches-nationalmuseum.de](http://www.bayerisches-nationalmuseum.de) <sup>6</sup> [www.museum-im-wasserwerk.de](http://www.museum-im-wasserwerk.de) <sup>7</sup> [www.stadtgeschichtliches-museum-leipzig.de](http://www.stadtgeschichtliches-museum-leipzig.de)

<sup>8</sup> [www.museumbund.de](http://www.museumbund.de) <sup>9</sup> <http://cidoc.mediahost.org> <sup>10</sup> <http://cidoc.ics.forth.gr> <sup>11</sup> [www.museumdat.org](http://www.museumdat.org) <sup>12</sup> [www.bam-portal.de](http://www.bam-portal.de)

<sup>13</sup> [www.europeana.org](http://www.europeana.org) <sup>14</sup> [www.museumsvokabular.de](http://www.museumsvokabular.de) <sup>15</sup> [www.zib.de/SIS/Projects/Museum](http://www.zib.de/SIS/Projects/Museum)

## KOOPERATIVER BIBLIOTHEKSVERBUND BERLIN-BRANDENBURG (KOBV)

**BEARBEITET VON:** Pascal-Nicolas Becker, Steffi Conrad-Rempel (seit 11/2009), Hildegard Franck, Thorsten Koch (seit 07/2009), Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger (bis 09/2009), Bettina Kasse, Wolfgang Peters-Kottig, Raluca Radu (bis 09/2009), Beate Rusch, Sascha Szott, Doreen Thiede (seit 03/2009), Sibylle Volz (bis 02/2009), Thomas Schwaier (bis 08/2009), Katja Nekolova (bis 08/2009)

**KOOPERATION:** Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg

**FÖRDERUNG:** Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin; Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.kobv.de](http://www.kobv.de)



Insbesondere für kleinere Fachhochschulbibliotheken bietet die gemeinsame Katalogisierungsdatenbank von BVB und KOBV Vorteile. In diesem Sinne die Glückwunschtorte anlässlich einer erfolgreich abgeschlossenen Datenmigration.

Ende 2007 ist der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg eine strategische Allianz mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) eingegangen mit dem Ziel, eine gemeinsame Katalogisierungsdatenbank aufzubauen und in Zukunftsfeldern gemeinsame Entwicklungsprojekte durchzuführen. Diese institutionalisierte Partnerschaft ist in der bundesdeutschen Verbundlandschaft einmalig und kann als zukunftsweisend verstanden werden.

Mit dem Aufbau der gemeinsamen Katalogisierungsumgebung haben die KOBV-Bibliotheken die Möglichkeit, die Vorteile eines klassischen Verbundkataloges zu nutzen. Konkrete Mehrwerte ergeben sich durch kooperative Verfahren zur Inhaltserschließung (Digitalisierungen von

Inhaltsverzeichnissen bzw. des Volltextes) und einer zentralen Versorgung mit Metadaten für E-Books. Vorzüge liegen auch in der Bereitstellung von Online-Schnittstellen zur Zeitschriftendatenbank sowie zu den überregionalen Normdateien.

Die aktive Teilnahme an einer zentralen Katalogisierungsdatenbank setzt die Migration der Datenbestände aus der entsprechenden Bibliothek voraus. Diese Migration erfolgt in einem abgestimmten, arbeitsteiligen Prozess zwischen der BVB-Verbundzentrale in München auf der einen und der KOBV-Zentrale und den betreffenden KOBV-Bibliotheken auf der anderen Seite. In der Aufbauphase sollen die Datenbestände von 17 Hochschulbibliotheken aus Berlin-Brandenburg in die bestehende bayerische

### VERÖFFENTLICHUNGEN:

Hildegard Franck, Thoralf Klein, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Gunar Maiwald: **Automatisierte Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken** – 3. Auflage, ZIB-Report 09-26. - September 2009

Monika Kuberek: **Strategien für die Zukunft der regionalen Informationsinfrastruktur – Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)**, In: Patrick S. Föhl, Iken Neisener (Hrsg.): „Regionale Kooperationen im Kulturbereich. Theoretische Grundlagen und Praxisbeispiele“, Bielefeld 2009, S. 251-259. Langfassung veröffentlicht als: ZIB-Report 09-35. - Oktober 2009



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Der KOBV bietet den Zugang zu den Katalogen und Benutzerdiensten zahlreicher Bibliotheken in Berlin und Brandenburg. Für ihre Bibliotheken wirkt die KOBV-Zentrale am Zuse-Institut als Dienstleistungs- und Entwicklungszentrum. KOBV-Mitgliedsbibliotheken sind alle 21 Universitäts- und Hochschulbibliotheken aus der Region, 2 Bibliotheken privater Hochschulen, beide Landesbibliotheken, 7 Bibliotheken der Obersten Bundesbehörden und 44 Forschungs- und Spezialbibliotheken. Dazu kommen als Partner der Verbund Öffentlicher Bibliotheken Berlins und Verbund der Öffentlichen Bibliotheken des Landes Brandenburg.

### DIENSTLEISTUNGEN

Im KOBV-Portal

<http://digibib.kobv.de> finden Sie bequem einen Überblick über die Bibliotheksbestände in Berlin und Brandenburg.

Mit einer einzigen Suche kann in zahlreichen Katalogen gleichzeitig recherchiert und anschließend eine Fernleihe angestoßen werden. Der KOBV-Bibliothekenführer

<http://bibliotheken.kobv.de> spiegelt mit über 660

Beschreibungen die reiche regionale Bibliothekslandschaft. Anerkannte Dienstleistungen

sind die fach-spezifischen Verbundkataloge Film

<http://digibib.kobv.de/vkfilm>, Noten

<http://digibib.kobv.de/vknoten>

und auch Judaika <http://digibib.kobv.de/judaica>

Verbunddatenbank eingespielt werden. Dabei besteht der Anspruch, in einem automatisierten Verfahren möglichst viele dublette Titeldaten zu erkennen, die in den Daten vorhandenen Verknüpfungsstrukturen zu bewahren, und nicht zuletzt Ausfallzeiten möglichst gering zu halten. Die Datenanalyse, notwendige Datenbereinigung sowie die Dublettenerkennung geschieht in enger Abstimmung in der KOBV-Zentrale, das eigentliche Laden der Daten in die Produktionsdatenbank übernehmen die bayerischen Kollegen. Als problematisch haben sich die Nummernverknüpfungen zwischen Stücktiteln und Serien erwiesen, für die es keinen Standard gibt. Erschwerend kommt hinzu, dass an den eher schlanken Serienaufnahmen die Dublettenprüfungen oftmals scheitern.

Nach der Pilotierung durch die Bibliothek der Europa Universität Viadrina wurden in 2009 sieben weitere Kataloge mit insgesamt 3 Millionen Titeldaten in die gemeinsame Verbunddatenbank eingespielt. Damit konnten folgende Einrichtungen mit der zentralen Katalogisierung beginnen: die Bibliotheken der Fachhochschule Brandenburg, der Fachhochschule Eberswalde, der Hochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, der Technischen Hochschule Wildau (FH), der Brandenburgische Technischen Universität Cottbus, der Technischen Universität Berlin und der Universität der Künste Berlin. Die Migration der weiteren Kataloge erfolgt nach Absprache mit den Bibliotheken und dem BVB. Die Aufbauphase wird sich noch bis Ende 2010 erstrecken.

Systemtechnisch entkoppelt von der Katalogisierungsumgebung sind die Dienstleistungen, die die KOBV-Bibliotheken ihren Benutzern im Internet zur Verfügung stellen. Zentraler Anknüpfungspunkt dafür ist nach wie vor der lokale Online-Katalog, der für den regionalen

Nachweis in das KOBV-Portal integriert wird. Bei den Benutzerdienstleistungen setzt auch das Projekt Shibboleth-Rechtmanagement an, das als gelungenes Beispiel für ein gemeinsames Entwicklungsprojekt von BVB und KOBV gelten kann. Der vom DFN-Verein unterstützte Shibboleth Standard sieht vor, dass sich ein Benutzer nur ein einziges Mal bei seiner Heimat-einrichtung – der Universität oder der Bibliothek – authentisieren muss (Single-Sign-On), um dann ortsunabhängig auf zugriffsbeschränkte Services zugreifen zu können. So wurden für die KOBV-Bibliothek des Leibniz-Zentrums für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) prototypisch die lizenzpflichtigen Zeitschriftenangebote mehrerer Verlage angebunden.

In der Folge stand die Erarbeitung von Konzepten für die Shibbolethisierung von Verbunddienstleistungen im Fokus. Im KOBV betrifft dies die Recherchedienste MetaLib und Primo; Bibliotheksanwendungen, die jeweils eine integrierte Suche über verschiedene Datenquellen ermöglichen. Beide Anwendungen stehen in der KOBV-Verbundzentrale als Hosting-Angebot interessierten Bibliotheken in einer konsortialen Umgebung zur Verfügung. Aber auch das von den großen Berliner Universitäten eingesetzte Bibliothekssystem Aleph soll shibbolethisiert werden. Für den BVB stehen für Shibboleth die Online-Fernleihe, das Gateway Bayern sowie der Inhaltsverzeichnisdienst auf der Agenda. Nachdem Konzepte vorliegen, ist die Aufnahme des Produktivbetriebs für das erste Halbjahr 2010 vorgesehen. Das Shibboleth-Projekt wirkt als Katalysator über seine zweijährige Projektlaufzeit hinaus. Die Bibliotheken beider Regionen sind für den Standard sowie eine enge Zusammenarbeit mit Rechenzentren und Verwaltungen sensibilisiert. Die KOBV-Zentrale steht ihnen weiter als Partner beratend zur Seite.

Gunar Maiwald, Wolfgang Peters-Kottig: **Ergebnisse aus dem BVB-KOBV-Entwicklungsprojekt „Literaturverwaltung“ – Handreichung für Bibliotheken**, ZIB-Report 09-16. - Mai 2009

## PROJEKTE DER ABTEILUNG WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.zib.de/SIS/Projects](http://www.zib.de/SIS/Projects)

### COMPUTERALGEBRA (REDUCE)

URL: [www.reduce-algebra.com](http://www.reduce-algebra.com)

Mitarbeiter: Winfried Neun,  
Herbert Melenk

### MUSEUMSPROJEKT

URL: [www.zib.de/SIS/Projects/Museum](http://www.zib.de/SIS/Projects/Museum)

Mitarbeiter: Barbara Fichtl, Carlos Saro,  
Beate Jahn (extern)

### COMBINATORIAL

#### OPTIMIZATION@WORK-II

URL: <http://co-at-work.zib.de>

Mitarbeiter: Thorsten Koch,  
Susanne Gottwald, Uwe Pöhle,  
Winfried Neun, Jian Li, Mathias Hecht,  
Wolfgang Dalitz

### ELEKTRONISCHES JOURNAL

#### „MATHEMATICAL PROGRAMMING COMPUTATION“ (MPC)

URL: <http://mpc.zib.de>

Mitarbeiter: Thorsten Koch,  
Wolfgang Dalitz

### FACHGRUPPE IUK DER DMV/ÖMG

#### WEB-SERVER DER FACHGRUPPE

#### „INFORMATION UND KOMMUNIKATION“

#### DER DEUTSCHEN MATHEMATIKER-

#### VEREINIGUNG/ÖSTERREICHISCHEN

#### MATHEMATISCHEN GESELLSCHAFT

#### (DMV/ÖMG)

URL: [www.zib.de/luK-DMV](http://www.zib.de/luK-DMV)

Mitarbeiter: Uwe Pöhle, Wolfgang Dalitz

### MATH-NET KOORDINIERUNGSSTELLE DER

#### AKTIVITÄTEN IM

#### IUK-BEREICH DER MATHEMATIK

URL: [www.math-net.org](http://www.math-net.org)

Mitarbeiter: Wolfgang Dalitz

### SERVER DER INTERNATIONAL

#### MATHEMATICAL UNION (IMU)

URL: [www.mathunion.org](http://www.mathunion.org)

Mitarbeiter: Wolfgang Dalitz

### ZENTRALE DES KOOPERATIVEN

#### BIBLIOTHEKSVERBUNDES

#### BERLIN BRANDENBURG (KOBV)

URL: [www.kobv.de](http://www.kobv.de)

Mitarbeiter: Beate Rusch

## PROJEKTE DER KOBV-ZENTRALE

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.kobv.de/kobv\\_projekte.html](http://www.kobv.de/kobv_projekte.html)

### IN 2009 ABGESCHLOSSENE PROJEKTE

KOBV-Volltextserver Version 2,  
Karin Herm, Raluca Radu, Sascha Szott,  
Doreen Thiede, Sibylle Volz,  
<http://volltexte.kobv.de>, 2007–2009

Rechtemanagement-System „ReMaS“,  
Raluca Radu, Sascha Szott, [www.kobv.de/kobv\\_projekte\\_abgeschlossen.html](http://www.kobv.de/kobv_projekte_abgeschlossen.html),  
2007–2009

OPUS 4 (DFG-Projekt mit der Universitäts-  
bibliothek Stuttgart, Bibliotheksservice-  
Zentrum Baden-Württemberg, Säch-  
sische Landesbibliothek – Staats- und  
Universitätsbibliothek Dresden, Univer-  
sitätsbibliothek Bielefeld, Saarländische  
Universitäts- und Landesbibliothek, Univer-  
sitätsbibliothek der Technischen Universität  
Hamburg-Harburg) Pascal-Nicolas Becker  
[www.opus-repository.org](http://www.opus-repository.org), 2008–2009

Rechtemanagement mit Shibboleth  
(Gemeinsames Entwicklungsprojekt mit  
dem BVB), Wolfgang Peters-Kottig,  
Gunar Maiwald, [www.kobv.de/projekt\\_rechtemanagement.html](http://www.kobv.de/projekt_rechtemanagement.html), 2008–2009

### LAUFENDE PROJEKTE

OpusSolr, Pascal-Nicolas Becker,  
Sascha Szott, [www.kobv.de/kobv\\_projekte\\_laufend.html](http://www.kobv.de/kobv_projekte_laufend.html), 2009–2010

Aufbau einer Gemeinsamen Verbunddaten-  
bank von KOBV und BVB, Hildegard Franck  
Monika Lill, Beate Rusch, Katarina Nekolo-  
va, Katja Schmidt, [www.kobv.de/bvb\\_kobv\\_verbunddatenbank.html](http://www.kobv.de/bvb_kobv_verbunddatenbank.html), 2008–2011

ASP-Dienst Library Search Engine (LSE),  
Thomas Schwaier, Sascha Szott,  
Doreen Thiede, Sibylle Volz, [www.kobv.de/kobv\\_projekte\\_laufend.html](http://www.kobv.de/kobv_projekte_laufend.html) und  
[waesearch.kobv.de](http://waesearch.kobv.de), 2009–2010

BibDir (DFG-Projekt mit dem Hessischen  
Bibliotheksinformationssystem und  
dem Bibliotheksservice-Zentrum Baden-  
Württemberg), Julian Heise, Thoralf Klein,  
Stefan Lohrum, Sascha Szott, [www.hebis.de/de/1ueber\\_uns/projekte/bibdir.php?](http://www.hebis.de/de/1ueber_uns/projekte/bibdir.php?),  
2008–2010

### DIENSTLEISTUNGEN FÜR BENUTZER AUS BILDUNG UND WISSENSCHAFT

**KOBV-Bibliothekenführer:**  
<http://bibliotheken.kobv.de>

**KOBV-Portal mit Online-Fernleihe:**  
<http://digibib.kobv.de>

**Virtueller Verbundkatalog Film  
(Gesamtbestand):**  
<http://digibib.kobv.de/vkfilm>

**Virtueller Verbundkatalog Film  
(nur Filme):**  
<http://digibib.kobv.de/vkfilm-filme>

**Virtueller Verbundkatalog Judaika:**  
<http://digibib.kobv.de/judaica>

**Virtueller Verbundkatalog Noten:**  
<http://digibib.kobv.de/vknoten>

### DIENSTLEISTUNGEN FÜR BIBLIOTHEKEN

**Automatisierte Fernleihe:**  
[www.kobv.de/bib\\_ofl.html](http://www.kobv.de/bib_ofl.html)

**ASP-Dienst Portale und SFX:**  
[www.kobv.de/bib\\_konsortial.html](http://www.kobv.de/bib_konsortial.html)

**ASP-Dienst Opus-  
und Archivierungsdienste:**  
[www.kobv.de/bib\\_opus\\_archivierung.html](http://www.kobv.de/bib_opus_archivierung.html)

**ASP-Dienst Primo:**  
[www.kobv.de/bib\\_primo.html](http://www.kobv.de/bib_primo.html)

**ASP-Dienst Verde:**  
[www.kobv.de/bib\\_verde.html](http://www.kobv.de/bib_verde.html)

**Hosting für lokale Applikationen:**  
[www.kobv.de/bib\\_hosting\\_software.html](http://www.kobv.de/bib_hosting_software.html)

**KOBV-Index:**  
[www.kobv.de/kobvindex.html](http://www.kobv.de/kobvindex.html)

**ABTEILUNG**

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG  
VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE  
OPTIMIERUNG  
WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

 **PARALLELE UND  
VERTEILTE SYSTEME**  
SUPERCOMPUTING UND IT-SERVICE

# PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

BEARBEITET VON: Prof. Dr. Alexander Reinefeld, Dr. Florian Schintke

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/CSR](http://www.zib.de/CSR)

## MISSION

Parallele und verteilte Systeme sind heute allgegenwärtig. Mit der Einführung von Multicore-Prozessoren und der zunehmenden Vernetzung von Computern stehen wir vor einem Paradigmenwechsel von der sequentiellen hin zur parallelen Programmierung.

Die Abteilung beschäftigt sich mit dem Entwurf skalierbarer, fehlertoleranter, verteilter Algorithmen. Ein Schwerpunkt unserer Forschungsarbeiten liegt im Management sehr großer verteilter Datenmengen. Grid- und Cloud-Computing, Web-Services und Peer-to-Peer-Protokolle haben aus dem Internet eine interaktive Plattform mit vielfältigen Dienstleistungen und einer großen wirtschaftlichen Bedeutung gemacht. Unsere Forschung dient dem besseren Verständnis der theoretischen Grundlagen und praktischen Implementation adaptiver, skalierbarer Dienste.

## STRUKTUR

Die Abteilung gliedert sich in drei Arbeitsgruppen:

- **Verteiltes Datenmanagement** (Ltg. Dr. Florian Schintke)
- **Skalierbare Algorithmen** (Ltg. Dr. Thorsten Schütt)
- **Hardwarenahe Algorithmen** (Ltg. Dr. Thomas Steinke)

## SPIN-OFFS

Es kann nicht Aufgabe eines Forschungsinstituts sein, Algorithmen bis zum marktfähigen Anwendungsprogramm umzusetzen. Sobald der „Proof-of-Concept“ einer neuen Methode oder eines Algorithmus gelungen ist, geben wir die Idee zur Weiterentwicklung und Verwertung an Spin-Offs ab. Im Jahr 2006 wur-

de hierfür die Firma onScale solutions GmbH gegründet, die, Nomen est Omen, skalierbare, verteilte Software entwickelt und vertreibt.

## VERTEILTES DATENMANAGEMENT

Diese AG entwickelt Methoden zur Verwaltung global verteilter Daten. Replikation und Synchronisation, Konsistenz und Fehlertoleranz spannen die zentralen Problemfelder unserer Forschung in diesem Gebiet auf.

Eines unserer Schlüsselprojekte ist das objektbasierte Dateisystem **XtreemFS**, das wir im EU-Projekt XtreamOS entwickelt haben. **XtreemFS** verwaltet die Metadaten separat von den Objektdateien und realisiert Replikation und Striping für einen schnellen und vor allem ausfallsicheren Datenzugriff im Internet. Trotz dieser innovativen Eigenschaften, die bislang kaum ein anderes verteiltes Dateisystem aufweist, ist **XtreemFS** kein reines Forschungsprojekt, sondern wird seit 2009 auch im Produktionsbetrieb eingesetzt.

Unser zweites Softwaresystem für verteiltes Datenmanagement heißt **Scalaris**. Es ist der weltweit erste verteilte Key/Value-Store, der Transaktionen auf replizierten Daten in einem strukturierten Overlay-Netzwerk realisiert. Erst kürzlich (Anfang 2010) hat Amazon, deren Dynamische-Datenbank bislang nur schwache Datenkonsistenz garantiert, auch eine Erweiterung für strenge Konsistenz angekündigt. Unsere teilweise patentierte Scalaris-Software wurde im Jahr 2008 mit dem ersten Preis des IEEE Scalability Challenge ausgezeichnet.

## SKALIERBARE ALGORITHMEN

Die Forschung dieser AG konzentriert sich auf die Aspekte Skalierbarkeit, Zuverlässigkeit und Effizienz. Unter Skalierbarkeit verstehen wir,



Scalaris wurde im internationalen IEEE-Scale Challenge 2008 mit dem 1. Preis ausgezeichnet. Im Jahr 2009 haben wir für Scalaris neue Lastverteilungsverfahren und ein nochmals verbessertes Transaktionsprotokoll entwickelt.

dass einer wachsenden Anfragelast durch Hinzufügen beliebig vieler Prozessoren begegnet werden kann. Zuverlässig ist ein Algorithmus, wenn einzelne Rechnerausfälle den Fortschritt der Berechnung nur peripher beeinflussen und effizient ist er, wenn er stets schnell ein Ergebnis liefert.

Diese drei Eigenschaften lassen sich am besten mit Peer-to-Peer-Algorithmen realisieren. Hier wird der Algorithmus nicht funktional sondern fraktal parallel auf gleichberechtigten Komponenten ausgeführt. Im EU-Projekt SELFMAN haben wir adaptive, fehlertolerante Algorithmen entwickelt, die auf Basis von Scalaris skalierbare, ausfallsichere Daten- und Rechendienste im Internet anbieten.

Die Zuverlässigkeit von IT-Systemen kann auch durch proaktive Modellierung verbessert werden. Mit Methoden des Dataminings sind wir in der Lage, den optimalen Zeitpunkt eines Neustarts von Servern zu berechnen, bevor es zu kritischen Fehlern kommt. Dies ist bei langlaufenden Diensten wie z.B. Web-Servern wichtig, deren Systemsoftware oftmals kleinere Fehler enthält (Speicherlecks, Prozessüberlauf), die das System im Laufe der Zeit zum Absturz bringen können.

Ein weiteres Highlight ist unsere Forschung zu skalierbaren Algorithmen für massiv parallele Rechner. Mit neuen MapReduce-Algorithmen<sup>1</sup> für baumstrukturierte Entscheidungsprobleme konnten wir erstmals sehr umfangreiche Lösungsräume mit bis zu 2<sup>43</sup> Zuständen vollständig lösen. Die retrograde Analyse des Datenmaterials von 80 TByte erlaubt nun die Entwicklung besserer Heuristiken für noch effizientere Suchalgorithmen.

## HARDWARENAHE ALGORITHMEN

Steigende Energiepreise und zunehmende Kühlungsprobleme machen den Betrieb von Hochleistungsrechnern zunehmend unrentabel. Als stromsparende und leistungsstarke Alternative bieten sich Grafikprozessoren und FPGAs<sup>2</sup> an. Diese sind allerdings aufwendig zu programmieren und nicht für alle Problemklassen geeignet. Wir evaluieren ihre Einsatzmöglichkeiten in verschiedenen Anwendungsgebieten wie z.B. der Simulation atomarer Prozesse und molekularen Systeme. Als Mitbegründer des OpenFPGA-Konsortiums<sup>3</sup> und der OpenAccelerator-Initiative treiben wir die Entwicklung einheitlicher Programmierstandards voran.

Neben Reed-Solomon-Algorithmen zur Redundanzberechnung für Speichersysteme auf Grafikprozessoren und FPGAs haben wir im Jahr 2009 auch Wear-Leveling-Algorithmen für den Einsatz von Flash-Speichern in RAID-Plattenspeichern untersucht. Flash-Speicher bieten, genau wie FPGAs, einen höheren Datendurchsatz bei geringerer Stromaufnahme und werden daher zunehmend in Standardprodukten eingesetzt.

<sup>1</sup> A. Reinefeld, T. Schütt. **Out-of-Core Parallel Heuristic Search with MapReduce**. High-Performance Computing Symposium HPCS 2009, Kingston, Ontario, Kanada. Springer LNCS 5976, pp. 323–336. <sup>2</sup> FPGAs (Field Programmable Gate Arrays) sind Spezialprozessoren, die keinen festen Instruktionssatz besitzen, sondern auf der Ebene von Schaltkreisen programmiert werden. Ihre Programmierung ist zwar komplizierter als die eines Standardprozessors, der ausführbare Programmcode ist aber in der Regel erheblich schneller. FPGAs haben zudem den Vorteil einer sehr geringen Stromaufnahme. <sup>3</sup> [www.OpenFPGA.org](http://www.OpenFPGA.org)  
<sup>4</sup> [www.openaccelerator.org](http://www.openaccelerator.org)

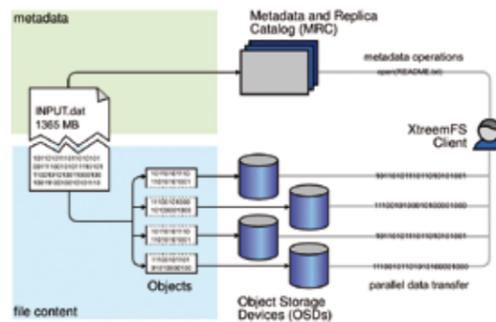
# XTREEMFS: EIN SKALIERBARES, VERTEILTES DATEISYSTEM

BEARBEITET VON: Jan Stender, Björn Kolbeck, Christian Lorenz, Felix Langner  
WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/CSR/Projects/xtreemos](http://www.zib.de/CSR/Projects/xtreemos)

**XtreemFS** ist ein verteiltes Dateisystem, sowohl die Server als auch die Clients können weltweit verteilt sein. Nutzer haben damit von jedem Internetzugang der Welt Zugriff auf **XtreemFS** Dateisysteme. Die eingebaute SSL-Unterstützung sorgt für die nötige Zugriffssicherung und Datenverschlüsselung.

Ein weiterer Aspekt von **XtreemFS** ist die Replikation der Daten über mehrere Rechenzentren hinweg. Mittels Datenreplikation stellt **XtreemFS** sicher, dass Daten auch im Falle von Ausfällen einzelner Rechner oder ganzer Rechenzentren verfügbar sind. Hierfür verfügt **XtreemFS** über zwei Replikationsmechanismen. Die „read-only“ Replikation verteilt unveränderliche Dateien und unterstützt insbesondere einen hohen Verteilungsgrad und partielle Replikate. Die „read-write“ Replikation implementiert eine normale Dateisystem-Semantik und sorgt für die Konsistenz der Replikate. Die Sicherstellung der Konsistenz ist mit zusätzlichem Aufwand verbunden, wodurch diese Form der Replikation nur für einen niedrigen Verteilungsgrad geeignet ist.

## ARCHITEKTUR



**XtreemFS** gehört zur Gruppe der objekt-basierenden Dateisysteme. Bei diesem Konzept werden die Datei-Inhalte von den Metadaten (z. B. Verzeichnisbaum, Dateiname, Berechtigungen) getrennt gespeichert. Die Metadaten werden vom Metadata and Replica Catalog (MRC) verwaltet. Dieser übernimmt auch die Authentifizierung der Benutzer und die Überprüfung der Zugriffsrechte. Die eigentlichen Lese- und Schreiboperationen werden dann direkt auf den Speicherservern (Object Storage Devices, OSDs) durchgeführt. Je nach Bedarf kann der Speicherplatz und die Bandbreite jederzeit durch das Hinzufügen weiterer OSDs erhöht werden. Der **XtreemFS-Client** übersetzt die lokalen Dateisystem-Operationen in die entsprechenden **XtreemFS**-Befehle und führt sie direkt auf dem jeweiligen MRC oder OSD aus. Da **XtreemFS** eine POSIX-kompatible Semantik bietet, können Applikationen und Benutzer **XtreemFS** wie ein lokales Dateisystem verwenden.

## SKALIERBARES REPLIKATIONS PROTOKOLL

Die Replikation der Datei-Inhalte wird in **XtreemFS** von den OSDs übernommen. Diese sorgen „hinter den Kulissen“ für die Verteilung der Daten und für die Konsistenz der Replikate. Um die Konsistenz der Replikate auch bei Änderungen an einer Datei sicherzustellen, verwendet **XtreemFS** die sogenannte Primary-Backup-Replikation. Dabei wird eines der Replikate zum Primary gewählt. Dieses Primary stellt dann sicher, dass alle Schreiboperationen in der richtigen Reihenfolge auf den anderen Replikaten (Backups) ausgeführt werden.

Die Primary-Backup-Replikation bietet den Vorteil, dass ein einzelner Rechner die Reihenfolge der Schreiboperationen festlegt; es ist keine Koordination zwischen den Replikaten nötig. Dies führt zu einer einfacheren Implementation



**XtreemFS** ist Open Source Software und läuft auf Linux, Windows und MacOS X. Die Software kann unter [www.xtreemfs.org](http://www.xtreemfs.org) heruntergeladen werden.

## XTREEMFS@ZMILE.EU

Zmile.eu ist ein web-basiertes Bildarchiv und wird im Rahmen des XtreemOS Projekts entwickelt. Für die Speicherung der Bilder wird **XtreemFS** verwendet. Die Replikation der Bilder durch **XtreemFS** bietet einen Schutz vor Datenverlust und erhöht die Ausfallsicherheit des Web-Portals. Zudem kann die **XtreemFS** Installation entsprechend dem Bedarf an Speicherplatz schnell und einfach vergrößert werden.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** **XtreemFS** ist ein repliziertes Dateisystem für weltweit verteilte Installationen wie z. B. beim Grid- oder Cloud Computing. Unser Fokus liegt auf der Erforschung von skalierbaren und fehlertoleranten Algorithmen und Mechanismen für die Sicherstellung der Datenkonsistenz, Metadaten-Speicherung und Backups. Ein weiteres Ziel von **XtreemFS** ist es, unsere Lösungen im praktischen Einsatz zu verifizieren: **XtreemFS** ist Open Source Software und wird in verschiedenen Projekten sowie von externen Benutzern in Produktionsumgebungen verwendet.

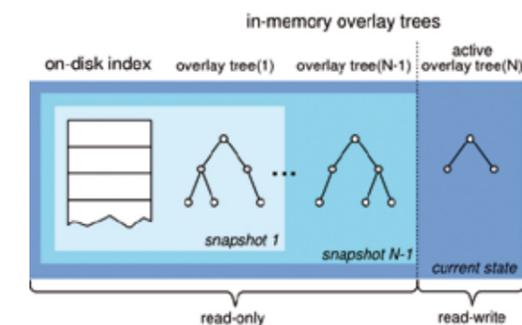
## XTREEMFS@MOSGRID

Im MOSGRID Projekt wird **XtreemFS** verwendet, um den Nutzern ein Zugriff auf Ihre Daten von jedem Rechenzentrum aus zu ermöglichen. Dafür wird eine **XtreemFS** Installation bereitgestellt, die Server in fünf Rechenzentren der Teilnehmer in Deutschland nutzt. Hier dient die Replikation der Datensicherheit und der Lokalität um Zugriffe schnell mit einem nahen Replikate zu beantworten.

und effizienteren Kommunikation im Vergleich zu Replikationsverfahren mit Koordination. Für die Wahl des Primary Replikats verwenden wir in **XtreemFS** den dezentralen Lease-Koordinations Algorithmus Flease.<sup>3,4</sup> Die Replikate handeln mittels Flease untereinander eine Lease aus, die einem Replikate die Primary-Rechte für einen begrenzten Zeitraum gibt. Fällt das Primary aus, so wird nach Auslaufen der Lease ein anderes Replikate zum Primary gewählt.

Die Mehrheit der replizierten Dateisysteme verwenden einen zentralen Konfigurations-Server, um ein Primary zu wählen. Damit ist aber die Zahl der Dateien und Server und damit die Skalierbarkeit des Gesamtsystems durch den zentralen Dienst und dessen Durchsatz beschränkt [5]. **XtreemFS** umgeht dieses Problem durch den Einsatz von Flease und erreicht dadurch echte Skalierbarkeit.

## EFFIZIENTE METADATENVERWALTUNG



Im Gegensatz zu den Datei-Inhalten werden die Metadaten in **XtreemFS** zentral verwaltet. Der Metadaten-Server wird dadurch zu einer kritischen Komponente mit Hinblick auf Leistung und Skalierbarkeit des Systems. Um eine effiziente Metadatenverwaltung in **XtreemFS** zu gewährleisten, haben wir **BabuDB**<sup>1</sup> entwickelt,

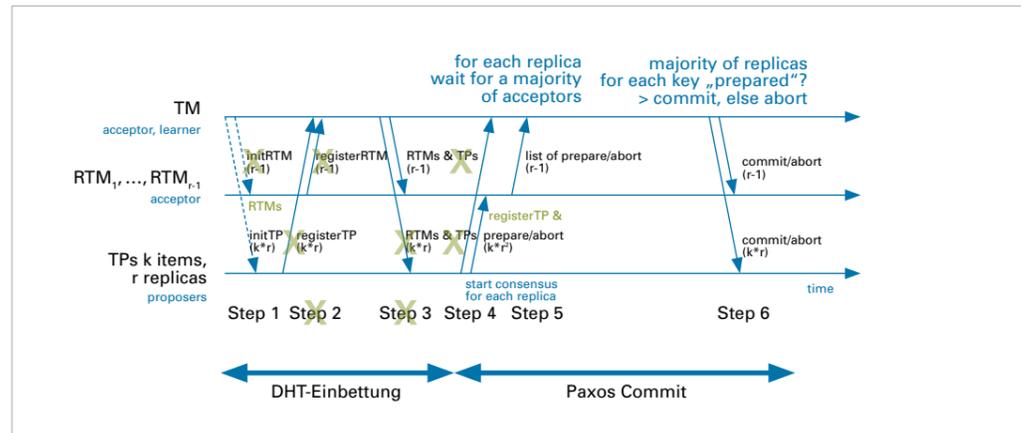
eine Datenbank zur Speicherung von Schlüssel-Wert-Paaren. **BabuDB** basiert auf dem Konzept der Log-Structured Merge Trees. Änderungen von Schlüssel-Wert-Paaren finden im Hauptspeicher statt und werden lediglich zwecks Wiederherstellung im Falle eines Fehlers oder Neustarts in einem Log festgehalten. Die ansonsten größtenteils unveränderlichen Schlüssel-Wert-Paare werden persistent in einer Datei gespeichert, welche sich effizient mit wenigen Festplattenzugriffen durchsuchen lässt.

**BabuDB** eignet sich besonders zur Verwaltung von Dateisystem-Metadaten. Insbesondere kurzlebige Dateien (über 50% der Dateien in einem System) kann **BabuDB** effizient verarbeiten, da das Anlegen und Löschen solcher Dateien größtenteils zu Änderungen im Hauptspeicher und nicht auf Festplatte führt. Im Gegensatz zu den in vielen anderen Dateisystemen verwendeten B-Trees erfordert **BabuDB** zudem keine aufwändigen Rebalancierungen persistent gespeicherter Bäume, was sich positiv auf die Leistung bei großen Dateisystemen auswirkt. Durch eine geeignete Abbildung von Dateisystem-Metadaten auf Schlüssel-Wert-Paare kann erreicht werden, dass Metadaten sowohl für einzelne Dateien als auch für komplette Verzeichnisse mit wenigen Datenbankzugriffen gefunden und aktualisiert werden können. Einzelheiten über **BabuDB** und dessen Verwendung in **XtreemFS** werden in einer Publikation beschrieben.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> <http://babudb.googlecode.com> <sup>2</sup> J. Stender, B. Kolbeck, M. Höggqvist, F. Hupfeld. **BabuDB: Fast and Efficient File System Metadata Storage**, 6th IEEE International Workshop on Storage Network Architecture and Parallel I/Os (SNAPI 2010). <sup>3</sup> B. Kolbeck, M. Höggqvist, J. Stender, F. Hupfeld. **Fault-Tolerant and Decentralized Lease Coordination in Distributed Systems**, ZIB-Report 10-02, 2010. <sup>4</sup> F. Hupfeld, B. Kolbeck, J. Stender, M. Höggqvist, T. Cortes, J. Marti, and J. Malo. **FaTLease: Scalable fault-tolerant lease negotiation with Paxos**. In: HPDC, 08: Proceedings of the 17th international symposium on High performance distributed computing, Boston, 2008. <sup>5</sup> M. K. McKusick, S. Quinlan. **GFS: Evolution on Fast-forward**. ACM Queue, vol. 7, no. 7, pp. 10–20, 2009.

# SCALARIS – TRANSAKTIONEN IN VERTEILTEN, STRUKTURIERTEN OVERLAY-NETZWERKEN

BEARBEITET VON: Thorsten Schütt, Florian Schintke, Alexander Reinefeld, Christian Hennig, Niko Kruber, Marie Hoffmann  
 WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/CSR/Projects/scalaris](http://www.zib.de/CSR/Projects/scalaris)



### VORTEILE VON SCALARIS

- Transaktionen
- strenge Datenkonsistenz
- Skalierbarkeit
- geringer Wartungsaufwand
- Selbstorganisation
- Ausfalltoleranz
- autom. Lastverteilung
- Replikation

Globale Informationsdienste, die aufgrund wachsender Datenvolumina und hoher Zugriffsraten nicht länger von einzelnen zentralisierten Servern realisiert werden können, sondern mit Hilfe vieler weltweit verteilter Computer erbracht werden, benötigen neue Softwarearchitekturen, um Ausfälle einzelner Systeme ohne Betriebsunterbrechung tolerieren zu können.

Insbesondere sogenannte Peer-to-Peer-Systeme und strukturierte Overlay-Netzwerke bieten hierfür eine attraktive Basis. Sie betrachten jeden Computer (Peer) als gleichwertige Ressource, die genutzt wird, um den geforderten Dienst zu erbringen. Dadurch vermeiden sie Verfügbarkeits- und Skalierbarkeitsengpässe, die bei dedizierter Rollenzuweisung zwangsläufig entstehen würden. Durch Selbstregulation und -überwachung passen sich strukturierte Overlay-Netzwerke autonom den jeweils zur Verfügung stehenden Ressourcen und Nutzungsbedingungen optimal an. Als Datenstruktur betrachtet erlauben sie die Speicherung von Schlüssel-Wert-Paaren.

Mit Chord<sup>1</sup> und SONAR<sup>2</sup> haben wir zwei strukturierte Overlay-Netzwerke entwickelt, die ein- und mehrdimensional auch Bereichsabfragen auf Schlüssel unterstützen – was bisherige Ansätze aufgrund der Nutzung von Hashingverfahren nicht leisten konnten.

Mit **Scalaris**<sup>3</sup> konnte das mögliche Anwendungsspektrum von strukturierten Overlay-Netzwerken zusätzlich um eine ausfalltolerante Transaktionsschicht erweitert werden.

### WIE HILFT SCALARIS?

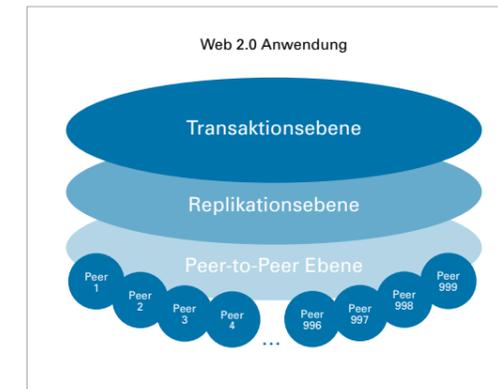
**Scalaris** kann die aufwendigen Backends heutiger Web 2.0-Anwendungen ersetzen, indem es mit Peer-to-Peer-Algorithmen aus unzuverlässigen Einzelsystemen einen ausfalltoleranten, zuverlässigen verteilten Key-Value-Store bildet. Dies spart Kosten für die Serverinfrastruktur, macht sie ausfalltolerant und vereinfacht durch Selbstkonfiguration den Betrieb.

Im Gegensatz zu anderen Key-Value-Stores, wie z.B. Dynamo, Hypertable oder CouchDB,



**Das Projekt in Kürze:** **Scalaris** erweitert das Anwendungsspektrum bisheriger Peer-to-Peer-Systeme, die beispielsweise in Tauschbörsen genutzt werden, um strenge Konsistenz und Transaktionen, zwei Eigenschaften traditioneller Datenbankmanagementsysteme – ohne die Vorteile des Peer-to-Peer-Computing wie Ausfalltoleranz und Skalierbarkeit aufzugeben. Dies gelingt durch geschickte Einbettung ausfalltoleranter Algorithmen in die zugrundeliegenden strukturierten Overlay-Netzwerke.

garantiert **Scalaris** eine strenge Datenkonsistenz mit atomaren Transaktionen bei nebenläufigen Operationen (ACID-Eigenschaft).



**Scalaris** ist in drei Architekturebenen für Skalierbarkeit Replikation und Transaktionen realisiert. Die unterste Ebene bildet aus Einzelsystemen ein spezielles strukturiertes Overlay-Netzwerk, das Flexibilität für Lastverteilung und Zugriffszeit-Optimierung bietet – beides wichtige Aspekte für die darüberliegenden Schichten.

Um Ausfallsicherheit gewährleisten zu können, werden Daten in der zweiten Ebene repliziert gespeichert. Der Replikationsgrad für ein **Scalaris**-System kann je nach Bedarf gewählt werden.

Alle Datenbankänderungen werden in Transaktionen ausgeführt, so dass die Kopien der beteiligten Daten atomar geändert werden. Zur Steuerung der Transaktionen wird der Paxos-Commit-Algorithmus verwendet, der auch beim Ausfall einzelner Server die effiziente und korrekte Ausführung der Transaktionen garantiert.

Die Einbettung des Paxos-Commit konnte im Jahr 2009 erneut verbessert werden (siehe Abbildung), was die Zugriffs- und Latenzzeiten auf das System weiter reduziert.

### P2P IN RECHENZENTREN

Im Gegensatz zu P2P-Tauschbörsen, die strukturierte Overlay-Netze zwischen den Rechnern der Heimanwender aufbauen, nutzt **Scalaris** die Vorteile dieser Systeme für Server in Rechenzentren. Wir erreichen dadurch ohne den Einsatz teurer Speziallösungen:

- Selbstorganisation und -konfiguration
- Skalierbarkeit
- Ausfalltoleranz

### EIN SCALARIS – MEHRERE ANWENDUNGEN

Um mehrere Anwendungen getrennt in einer **Scalaris**-Instanz auszuführen, wird jeder Anwendung ein Teil des Overlays zugeordnet. Die Trennung der Anwendungen in der logischen Struktur erlaubt es dank der Flexibilität unseres Overlays präzise einzelne Server den verschiedenen Anwendungen zuzuordnen. Gleichzeitig kann flexibler auf geänderte Leistungsanforderungen reagiert werden, indem dynamisch Server zwischen den Anwendungen ausgetauscht werden.

### EIN SCALARIS – MEHRERE RECHENZENTREN

Für global agierende Dienstleister kann **Scalaris** die Server mehrerer Rechenzentren effizient zu einer großen Datenbasis zusammenschließen.<sup>4</sup> Durch die Trennung der Applikationen in der logischen Ringstruktur des Overlay-Netzwerks können individuell jedem Replikat und jeder Anwendung Server in verschiedenen Rechenzentren zugeordnet werden, um die Daten möglichst nahe beim Anwender zu speichern und so die Zugriffszeit zu minimieren.

<sup>1</sup> T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld. **Structured Overlay without Consistent Hashing: Empirical Results.** GP2PC Workshop at the 6th IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CCGrid 2006), 16–19 May 2006, Singapore. <sup>2</sup> T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld. **A Structured Overlay for Multi-Dimensional Range Queries.** 13th Intl. Euro-Par Conference, Rennes, France, August 2007, Springer LNCS 4641, pp. 503–513. <sup>3</sup> A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt, S. Haridi. **A Scalable, Transactional Data Store for Future Internet Services.** In: G. Tselentis et al. (eds.) Towards the Future Internet – A European Research Perspective, IOS Press, ISBN 978-1-60750-007-0, 2009, pp. 148–159.

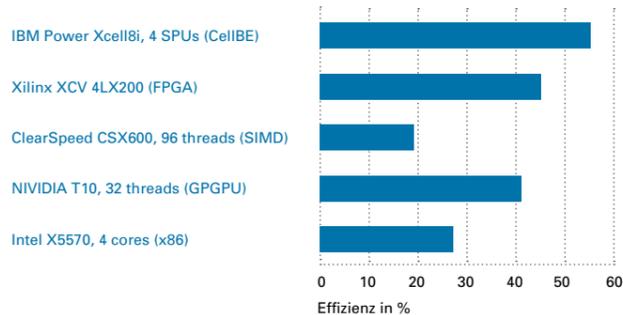
<sup>4</sup> T. Schütt, A. Reinefeld, F. Schintke, M. Hoffmann. **Gossip-based Topology Inference for Efficient Overlay Mapping on Data Centers,** 9th Int. Conf. on Peer-to-Peer Computing, Seattle, September 2009.

# SCHNELL UND ENERGIESPAREND – NEUE TECHNOLOGIEN FÜR DAS HPC

BEARBEITET VON: Thomas Steinke, Kathrin Peter, Johannes Bock, Sebastian Borchert

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/CSR/Projects/mc2](http://www.zib.de/CSR/Projects/mc2)

## REED-SOLOMON-ENCODING AUF MANY-CORE-PLATTFORMEN REED-SOLOMON-EFFIZIENZ



In der Abbildung ist eine SSD mit den Flash-Speichereinheiten und dem Controller gezeigt. (Quelle: [ssd-solid-state-drive.net](http://ssd-solid-state-drive.net))

Fehlertolerierende (Erasure) Codes fügen zu einer Menge von Originaldaten zusätzliche redundante Daten hinzu, um im Fehlerfall die verlorenen Daten wiederherzustellen. Reed-Solomon (RS) Codes sind flexibel in der Wahl des Kodierungsschemas und gehören zur Gruppe der MDS-Codes (Maximum Distance Separable). MDS bedeutet, dass in einer Gruppe von  $k$  Datenworten und  $m$  Redundanzworten bis zu  $m$  gleichzeitige Ausfälle toleriert werden können. Cauchy Reed-Solomon verwendet im Unterschied zum originalen RS-Algorithmus nur XOR-Operationen, die schnell auf jedem Prozessor ausführbar sind. Dadurch können selbst komplexe Kodierungsschemata einfach und schnell berechnet werden. Wir untersuchen ausfalltolerierende Codes für zwei Anwendungsgebiete:

1. die Verwendung von Codes mit neuen Speichertechnologien wie Solid-State Speicher und

In diesem Jahrzehnt steht man bei der Durchführung von Computersimulationen vor einer der größten Herausforderungen. Mit dem Verschwinden von Einzelprozessorsystemen sieht man sich gezwungen, die parallelen Rechen- und Speicherressourcen auf allen Computern – von mobilen Geräten bis zu den Hochleistungsrechnern (HPC) – effektiv zu nutzen. Wir stehen in der Breite vor einem Paradigmenwechsel. Um dem damaligen Bedarf an Rechenleistung nachzukommen, ist man im HPC-Bereich schon seit Mitte der 1990er Jahre den Weg in Richtung massiv-paralleles Rechnen gegangen. Am ZIB wird mittlerweile die 4. Generation eines massiv-parallelen Rechners betrieben, der mit 10200 Rechenkernen und einer Datenspeicherkapazität von 425 TByte<sup>1</sup>/2,5 PByte<sup>2</sup> ausgestattet ist.

Derartige, auf Standardkomponenten beruhende künftige Rechnersysteme stellen jedoch die Betreiber aufgrund der Kosten für die Infrastruktur (Stromverbrauch und Kühlung) vor hohe betriebliche Herausforderungen. Es zeichnet sich ab, dass für die kommenden hochkomplexen Simulationsszenarien im HPC- und Enterprise-Computing energieeffiziente Lösungen gefun-

den werden müssen (Green IT). Wir evaluieren dafür am ZIB neue energiesparende Technologien zur effizienten parallelen Verarbeitung und Speicherung hochvolumiger Daten.

### MASSIV-PARALLELES RECHNEN MIT HARDWARE-BESCHLEUNIGERN

Hardware-Beschleuniger eröffnen alternative Wege, um eine hohe Anwenderleistung bei gleichzeitig moderatem Stromverbrauch und Kühlaufwand zu erzielen. Prominenteste Beispiele für heutige Hardware-Beschleuniger sind GPGPUs,<sup>3</sup> FPGAs<sup>4</sup> und Cell BE.<sup>5</sup> Rechen- oder datenintensive Abarbeitungsschritte (Kernel) können auf geeignete Hardware-Beschleuniger migriert werden, um höhere Durchsatzraten zu erzielen.

In 2009 haben wir sowohl rechenintensive Algorithmen wie z.B. ein numerisches Integrationsverfahren<sup>6,7</sup> oder Kernel für die Berechnung von Paarwechselwirkungen als auch datenintensive Algorithmen wie den Reed-Solomon-Algorithmus<sup>8</sup> auf GPGPUs, FPGA, CellBE und ClearSpeed<sup>9</sup> implementiert und die Plattformen evaluiert. Bei dieser Evaluierung spielen neben der erzielten Anwenderleistung auch die



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Mit Hardware-Beschleunigern wie GPGPUs und FPGAs sowie Flash-Speichern als Alternative zu Festplattenspeichern stehen neue Technologien zur Verfügung, die den steigenden Anforderungen an Rechenleistung, persistenter Speicherung und Energieeffizienz besser gerecht werden können. Für die produktive Nutzung von GPGPUs- und FPGAs sind noch eine Reihe von Anforderungen an Standards und Werkzeugen zu erfüllen. Die bei Flash-Speichern vorzufindende Asymmetrie zwischen Lese- und Schreibgeschwindigkeit und die nutzungsabhängige Lebensdauer der Speicherzellen stellen neue Herausforderungen bei deren Einsatz dar.

2. die Zuverlässigkeit der Datenspeicherung in verteilten Dateisystemen (z. B. **XtreemFS**).

Wir haben den Cauchy-RS-Algorithmus auf verschiedenen Hardware-Beschleuniger-Plattformen implementiert.

Die Effizienz unserer Implementierung spiegelt das Verhältnis zwischen der erzielten RS-Rate und der theoretischen Bandbreite zum Hauptspeicher wider (s. Abb.).

Auf der QS22-Plattform mit dem Power Xcell8i erreichen wir die höchste Effizienz: Ein SPU-Core liefert bereits eine Rate von 5,6 GByte/s. Die FPGA-Implementierung<sup>11</sup> auf der RC100-Plattform erzielt zwar nur 1,4 GByte/s, zeigt jedoch – ähnlich zu der GPU-Plattform – eine Effizienz von mehr als 40%. Ein x86-Core (Intel Nehalem) liefert mit einer Rate von 4,6 GByte/s den zweithöchsten Durchsatz bei einer Effizienz von 27%.

Einschätzung der Qualität der Programmierumgebungen sowie der Aufwand bei der Nutzung der jeweiligen Technologie eine Rolle.

### PERSISTENTE DATENSPEICHERUNG MIT FLASH-SPEICHERN

Flash-Speicher, genauer bezeichnet als Flash-EEPROM,<sup>10</sup> sind nicht-flüchtige, elektronisch wiederbeschreibbare Speicher, welche die Informationen ohne Energiezufuhr beibehalten. Die Datenbits liegen als Ladung auf Floating-Gate-Transistoren vor. Dies ermöglicht einen robusten, leisen und energieeffizienten Betrieb ohne sich bewegende mechanische Teile. Weitere Vorteile von Flash-Speichern sind die deutlich höheren Leserate beim wahlfreien Zugriff und die sehr geringe Zugriffslatenz. Auf der anderen Seite gibt es hardware-spezifische Besonderheiten. Beispielsweise haben Flash-Speicher durch die Alterung der Speicherzellen nur eine begrenzte Anzahl von Wiederbeschreibzyklen. Außerdem ist vor dem (wiederholten) Beschreiben einer Speicherzelle eine grobgranulare Löschoption notwendig. Im sogenannten Flash-Translation-Layer werden diese Besonderheiten durch spezielle Algorithmen gehandhabt, die die Datenplatzierung bestimmen und somit die Zugriffsgeschwindigkeit und Langlebigkeit der Speicherzellen beeinflussen. Flash-Speicher, speziell in SSDs (Solid State Drives), stellen zwar eine direkte Alternative zu Festplatten dar, können jedoch diese bedingt durch ihre charakteristischen Eigenschaften nicht immer optimal ersetzen. Besonders beim sequentiellen Zugriff können Magnetplatten ähnliche oder sogar höhere Lese- und Schreibraten erreichen.

Wir untersuchen, wie existierende Herangehensweisen zur parallelen Speicherung mit Solid-State-Technologien angewendet werden

können. Beispielsweise werden die Optionen für die Verteilung der Löschoptionen in einer RAID-ähnlichen Anordnung der Flash-Speicher betrachtet. Gleichzeitig sollen zur Erhöhung der Zuverlässigkeit Erasure Codes zum Einsatz kommen.

### AUSBLICK

Der Einsatz von Hardware-Beschleunigern wie GPGPUs in numerisch aufwendigen Simulationen und FPGAs in datenintensiven Verarbeitungsprozessen ist ebenso vielversprechend wie die schrittweise Substitution von Magnetplatten durch Flash-Speicher zum Zwecke der persistenten Datenspeicherung.

Implementierungen auf Hardware-Beschleunigern sind allerdings zur Zeit nicht mit derselben Produktivität umsetzbar wie man es von der Software-Entwicklung auf Standardprozessoren kennt. Obwohl mit OpenCL erste Standardisierungen kürzlich verabschiedet wurden, fehlen allgemein akzeptierte Standards und robuste Werkzeuge.

Die persistente Datenspeicherung mit Flash-Speichermedien ist im Vergleich zur traditionellen Festplatte energieeffizienter und robuster. Damit die Bandbreiten bei I/O-Operationen erhöht und die Grenzen bei der Zahl der Schreibzyklen ausgedehnt werden können, werden dafür geeignete neue Algorithmen evaluiert.

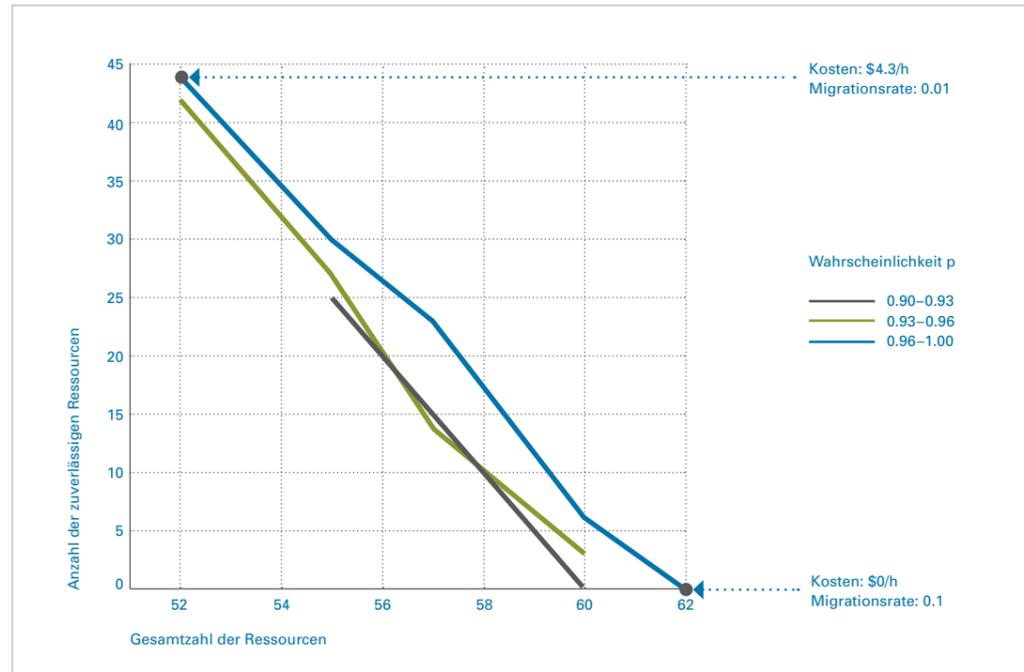
<sup>1</sup> verfügbare Plattenspeicherkapazität <sup>2</sup> verfügbare Archivspeicherkapazität <sup>3</sup> General Purpose Graphics Processing Unit <sup>4</sup> Field Programmable Gate Array <sup>5</sup> Cell Broadband Engine (IBM, Toshiba, Sony) <sup>6</sup> C. J. Gillan; T. Steinke, J. Bock, I. Spence, N. S. Scott. **Leveraging the synergy of Mitron-C and the SGI RC-100 to study evaluation of two dimensional numerical integrals.** Many-Core and Reconfigurable Supercomputing Conference (MRSC '09), Zuse Institute Berlin, Germany, March 2009. <sup>7</sup> C. J. Gillan, T. Steinke, J. Bock, S. Borchert, I. Spence, N. S. Scott. **Programming challenges for the implementation of numerical quadrature in atomic physics on FPGA and GPU accelerators.** Frontiers of GPU, Multi-core and Many-core Systems (FGMMS 2010), accepted. <sup>8</sup> K. Peter, S. Borchert, J. Bock and T. Steinke. **Off-loading the Reed-Solomon algorithm to hardware accelerators.** Many-Core and Reconfigurable Supercomputing Conference (MRSC 2010), accepted. <sup>9</sup> SIMD-Prozessor der Fa. ClearSpeed

<sup>10</sup> Electronically Erasable Programable Read Only Memory <sup>11</sup> Der RS-Algorithmus für FPGAs wurde in der Hochsprache Mitron-C formuliert und unter Verwendung des Mitronics SDK transparent in ein Hardware-Design übersetzt.

# STATISTISCHE MODELLIERUNG FÜR VERLÄSSLICHE COMPUTERSYSTEME

BEARBEITET VON: Artur Andrzejak

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/CSR/Projects/modeling](http://www.zib.de/CSR/Projects/modeling)



## VORHERSAGE VON AUSFÄLLEN

Die Vorhersage von Ausfällen besitzt eine große Bedeutung für das effiziente Systemmanagement in einer Vielzahl von Szenarien. So erlaubt sie bei kritischen, hochzuverlässigen Systemen präventive Maßnahmen (wie Daten- und Prozesstransfer) noch vor dem Eintreten eines Totalausfalls. Die schnelle Erkennung von Laständerungen in großen, verteilten Systemen (Cluster oder Grids) erleichtert das Scheduling und kann Ausfälle durch Überlast verhindern. Dieses Szenario haben wir in einer Studie zusammen mit Kollegen der UCY Zypern untersucht. Dabei wurden vielfältige Systemdaten von 197 Grid Clustern des EGEE-II Grids über einen Monat gesammelt. Anschließend wurden diese Daten mit den Ausfällen einzel-

ner Cluster mittels Klassifikationsalgorithmen korreliert, um kurzzeitig vorherzusagen, welche der Cluster in den nächsten 5-10 Minuten ausfallen werden. Die Studie<sup>1</sup> fokussierte sich dabei auf die Wirkung der Datenverarbeitung, der Klassifikationsalgorithmen, sowie der Parameter auf die Vorhersagegenauigkeit. Es zeigte sich, dass die Genauigkeit der Vorhersagen stark von der Auswahl der Eingabedaten und ihrer Vorverarbeitung abhängt, jedoch weniger von dem Typ des Klassifikationsalgorithmus.

## SOFTWAREALTERUNG UND „REJUVENATION“

Das Phänomen der Softwarealterung führt durch eine Akkumulierung von Zustandsfehlern (insbesondere Speicherverlusten) zu einer Verminderung der Anwendungsleistung oder

Um eine hohe kollektive Verfügbarkeit einer Gruppe von Ressourcen zu erreichen, werden den unzuverlässigen Ressourcen auch zuverlässige (aber teurere) Ressourcen beigemischt. Die blaue durchgezogene Kurve zeigt Pareto-optimale Lösungen, bei denen die kollektive Verfügbarkeit von 50 Servern über 4 Stunden mit einer Wahrscheinlichkeit von mindestens 0.96 erreicht wird. Die Enden der Kurve illustrieren den Trade-Off: Eine Lösung weist entweder höhere Kosten und dafür eine geringere Migrationsrate auf (links), oder sie hat geringe Kosten, die mit einer höheren Migrationsrate erkauft werden müssen (rechts). Die Lösungen sind Pareto-optimal: Man kann in einer Gruppe weder die Gesamtanzahl der Ressourcen noch den Anteil von zuverlässigen Ressourcen verkleinern, ohne die vorgegebene Wahrscheinlichkeit des Erreichens der kollektiven Verfügbarkeit zu unterschreiten.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Die statistische Modellierung wird zunehmend eingesetzt, um Fehlfunktionen und Ausfälle großer IT-Systeme rechtzeitig zu erkennen. Sie ist somit einer der Grundbausteine zur Sicherstellung der Zuverlässigkeit von Softwaresystemen. In diesem Projekt werden angewandte Statistik und maschinelles Lernen als Methoden benutzt, um folgende Lösungen zu ermöglichen: Vorhersage von Ausfällen in großen verteilten Systemen, Modellierung von Leistungsverlusten aufgrund von Softwarealterung, und Sicherstellung der Verfügbarkeit in Pools von unzuverlässigen Ressourcen, wie z. B. Büro-PCs.

zu einem vollständigen Funktionsausfall. Hier von sind häufig Dienste betroffen, die lange Laufzeiten ohne Neustart aufweisen, wie z. B. Webserver. Eine effektive Beseitigung dieses Problems ist daher von hoher wirtschaftlicher Bedeutung. In komplexen IT-Systemen ist die Software-Rejuvenation<sup>2</sup> – d. h. der Neustart einer Anwendung, des Betriebssystems oder des ganzen Clusters – immer noch die wichtigste Maßnahme zur Beseitigung von Softwarealterung. Problematisch ist allerdings die Unterbrechung der Verfügbarkeit und ein eventueller Verlust der Arbeitsdaten. Unsere Forschung nutzt Modelle der Systemleistung und der Systemumgebung, um die Rejuvenation adaptiv, d. h. weder zu häufig noch zu spät auszuführen, wodurch die durchschnittliche Verarbeitungsrate des Servers maximiert wird.

Im Rahmen der Untersuchungen zu diesem Thema wurden Experimentalumgebungen entwickelt, die die Durchführung komplexer Experimente ermöglichen.<sup>3</sup> Eine solche Umgebung besteht aus einem Lastgenerator (Stress Test Tool) mit einer Mess- und Evaluierungsinfrastuktur der zu untersuchenden Softwarekomponente (in unserem Fall dem Anwendungsserver des TPC-W Benchmarks), sowie einem Modul zum Simulieren von Speicherlecks. Als Lastgenerator wurde der Open-Source-Lastgenerator CLIF 1.3 eingesetzt, sowie die Erweiterung einer Stresstest-Software, die im Rahmen der Kooperation mit UPC Barcelona entwickelt wurde.<sup>4</sup> Eine weitere Umgebung namens RUBiS<sup>5</sup> basiert auf der Simulation eines komplexen Auktionsdienstes. Sie erlaubt Experimente mit einer Vielzahl unabhängiger Fehler oder Quellen der Softwarealterung.

## NUTZUNG KOSTENLOSER, UNZUVERLÄSSLIGER RESSOURCEN

Das dritte Thema in diesem Projekt ist die Nutzung der für BOINC-Projekte<sup>6</sup> kostenlos von Privatpersonen zur Verfügung gestellten Ressourcen. Diese Ressourcen sind zwar kostenlos, aber inhärent unzuverlässig, da sie jederzeit ohne Vorwarnung abgeschaltet werden können. In Zusammenarbeit mit dem BOINC/SETI@home-Team der UC Berkeley und INRIA haben wir untersucht, wie diese unzuverlässigen Ressourcen mit teuren, aber zuverlässigen Ressourcen vermischt werden können, um sowohl geringe Kosten als auch eine hohe kumulative Verfügbarkeit zu erreichen.<sup>7</sup> Als zuverlässige Ressourcen haben wir Systeme der „Amazon Elastic Computing Cloud“ (EC2) verwendet.

In einem neu entwickelten Modellierungsverfahren berechnen wir Pareto-optimale Lösungen des Problems „Welche Redundanz und welcher Anteil von verlässlichen Ressourcen ist nötig, um eine kumulative Verfügbarkeit einer Gruppe von Ressourcen über ein festgelegtes Zeitintervall mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit zu erreichen?“ Ein Nutzer dieser Ressourcen kann aus einer Menge diejenigen Lösungen auswählen, die für seine Anwendung bezüglich Kosten und Migrationsrate ideal sind. Die Migrationsrate misst dabei den Anteil der unzuverlässigen Ressourcen, die periodisch ersetzt werden müssen, um eine langfristige kollektive Verfügbarkeit mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit zu erreichen.

<sup>1</sup> A. Andrzejak, D. Zeinalipour-Yatzi, M. D. Dikaiakos, **Improving the Dependability of Computational Grids via Short-Term Failure Predictions**, CoreGRID Workshop at Euro-Par 2009, Delft, Niederlande, August 24, 2009.

<sup>2</sup> A. Andrzejak, **Generic Self-Healing via Rejuvenation: Challenges, Status Quo, and Solutions**, SASO Workshop on Architectures and Languages for Self-Managing Distributed Systems (SELFMAN@SASO09), September 15, 2009. <sup>3</sup> A. Casanovas, J. Alonso, J. Torres, A. Andrzejak, **Building a Distributed Generic Stress Tool for Server Performance and Behavior Analysis**, Fifth IEEE International Conference on Autonomic and Autonomous Systems, ICAS 2009, Valencia, Spain, pp. 342–345, April 20–25, 2009. <sup>4</sup> Ada Lho-la Casanovas León, **Building a Generic Stress Tool for Server Performance and Behavior Analysis**, Master Thesis, Barcelona School of Informatics, UPC, September 2008. <sup>5</sup> RUBiS: Rice University Bidding System, OW2 Consortium, <http://rubis.ow2.org> <sup>6</sup> D. P. Anderson, BOINC: **A System for Public-Resource Computing and Storage**. In Proceedings of the 5th IEEE/ACM international Workshop on Grid Computing (November 8, 2004). <sup>7</sup> A. Andrzejak, D. Kondo, D. P. Anderson, **Exploiting Non-Dedicated Resources for Cloud Computing**, 12th IEEE/IFIP Network Operations and Management Symposium (NOMS 2010), Osaka, Japan, April 19–23, 2010.

## PROJEKTE DER ABTEILUNG PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

ALLE PROJEKTE IM NETZ AUSFÜHRICH UNTER: [www.zib.de/CSR/Projects/index](http://www.zib.de/CSR/Projects/index)

### XtreemFS – EIN SKALIERBARES, VERTEILTES DATEISYSTEM

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/xtreemos](http://www.zib.de/CSR/Projects/xtreemos)

**Mitarbeiter:** B. Kolbeck, J. Stender, C. Lorenz, F. Langner

**Partner:** NEC (Deutschland),

BSC (Spanien), ICAR-CNR (Italien)

**Forschungsförderung:** EU, Integrated Project XtreamOS

**Inhalt:** XtreamFS ist ein von uns entwickeltes, verteiltes, föderiertes und repliziertes Dateisystem, das den Nutzern verteilter Cluster-, Grid- oder Cloud-Infrastrukturen einen einfachen und schnellen Zugriff auf ihre Dateien ermöglicht. Global verteilte IT-Systeme erfordern besondere Maßnahmen, um den Ausfall einzelner Komponenten (Datenserver, Netzwerkverbindungen) zu tolerieren, hohe Latenzzeiten zu verbergen und unterschiedliche I/O-Bandbreiten auszugleichen.

### SELFMAN – ALGORITHMEN FÜR SELBST-REGULIERENDE, VERTEILTE SYSTEME

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/selfman](http://www.zib.de/CSR/Projects/selfman)

**Mitarbeiter:** T. Schütt, M. Höggqvist, A. Andrzejak, A. Reinefeld, N. Kruber, C. Hennig, M. Hoffmann

**Partner:** UCL (Belgien), KTH (Schweden), INRIA (Frankreich), France Telecom, NUS Singapur

**Forschungsförderung:** EU

**Inhalt:** SELFMAN ist ein forschungsorientiertes EU-Projekt, in dem Algorithmen für das autonome Management global verteilter Systeme entwickelt und analysiert werden. Die Grundlage dazu bilden die Techniken zweier Forschungsbereiche: strukturierte Overlay-Netzwerke und fortgeschrittene Komponenten-Modelle. Unser Beitrag in SELFMAN besteht in der Entwicklung eines transaktionalen Key/Value-Speichersystems, der gegen Knotenausfälle weitestgehend resistent ist und eine gute Lastverteilung garantiert.

### D-GRID-PROJEKTE IN DEN BEREICHEN MEDIZIN, BIOINFORMATIK UND LEBENS-WISSENSCHAFTEN

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects](http://www.zib.de/CSR/Projects)

**Mitarbeiter:** T. Steinke, K. Peter, M. Lindner

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Wir sind an vier D-Grid-Projekten beteiligt, die dem Aufbau und der Etablierung einer Grid-Infrastruktur für Anwendungen aus den Bereichen der Medizin, Bioinformatik und den Lebenswissenschaften dienen.

Im MediGRID-Projekt ([URL: www.medigrd.de](http://www.medigrd.de)), haben wir dazu beigetragen, dass für die biomedizinische Community in Deutschland eine Infrastruktur geschaffen wurde, auf der ausgewählte Anwender-szenarien die Vorteile des Grid für diese Community evaluieren konnten.

Die Projekte Services@MediGRID ([URL: http://services.medigrd.de](http://services.medigrd.de)) und MedInfoGrid ([URL: www.medinfogrid.de](http://www.medinfogrid.de)) bauen auf den erzielten Erfahrungen auf und erweitern die MediGRID-Infrastruktur um vertikale Grid-Dienste für Monitoring, Accounting und Billing. Neue biomedizinische Nutzergruppen werden aufgrund der gesammelten Erfahrungen systematischer und schneller in die Nutzung von Grid-Infrastrukturen eingeführt.

Im PneumoGrid-Projekt ([URL: www.pneumogrid.de](http://www.pneumogrid.de)) stellen wir Ressourcen für den Betrieb eines Bildarchivierungs- und Kommunikationssystems (PACS) bereit, das medizinische Bilddaten der Berliner Charité für die Nutzer des PneumoGrid bereithält. Gemeinsam mit der Charité werden Anwendungsszenarien, die eine Visualisierung der Prozesskette erfordern, auf dem Visualisierungscluster am ZIB erprobt.

### MoSGrid – MOLECULAR SIMULATION GRID

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/mosgrid](http://www.zib.de/CSR/Projects/mosgrid)

**Mitarbeiter:** T. Steinke, N. Kruber, P. Schäfer

**Partner:** Universitäten Köln, Tübingen, Paderborn, Dresden; Bayer, BioSolveIT, COSMOlogic, GETLIG & TAR, Originex, FZ Jülich, Turbomole, Sun Microsystems, Schrödinger

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Das MoSGrid-Projekt ermöglicht die Nutzung verteilter Systeme für Molekülsimulationen indem es Wissenschaftler aus dem chemischen Umfeld bei der Ausführung von Simulationsrechnungen im Grid unterstützt. Über ein webbasiertes Portal wird den Nutzern Zugriff auf Anwendungs-Workflows und Datenrepositorien gegeben. Letztere beinhalten Moleküldatenbanken, um auf Simulationsergebnisse und -protokolle für die bereitgestellten Anwendungen zugreifen zu können. Unsere Aufgabe im Projekt besteht in der Entwicklung von Technologien zum Betrieb von chemischen Datenrepositorien und deren technischer Umsetzung.

### ASTROGRID-D GERMAN ASTRONOMY COMMUNITY GRID

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/astrogrid\\_d](http://www.zib.de/CSR/Projects/astrogrid_d)

**Mitarbeiter:** T. Röblitz, M. Höggqvist

**Partner:** Astrophysikalisches Institut Potsdam, MPI für Gravitationsphysik, MPI für Astrophysik, MPI für Extraterrestrische Physik, TU München, Uni Heidelberg

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Das Projekt AstroGrid-D stellt der astrophysikalischen Forschergemeinde eine kollaborative Arbeitsumgebung, basierend auf Grid-Technologien, zur Verfügung. Die Forschungsthemen der Astrowissenschaften decken ein weites Spektrum ab, das von Simulationen der Sternbildung über die Auswertung von Daten von Satellitenmissionen bis hin zur verteilten Beobachtung mittels robotischer Teleskope reicht. Diese Aufgaben erfordern speziell angepasste Dienste für die Verwaltung von Daten, Ressourcen und Aktivitäten. Als Kernkomponente, die von diesen Diensten genutzt wird, haben wir den Informationsdienst Stellaris entwickelt.

### DGI 2 – D-GRID-INTEGRATIONSPROJEKT 2

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/dgi2](http://www.zib.de/CSR/Projects/dgi2)

**Mitarbeiter:** F. Schintke, M. Höggqvist, K. Peter

**Partner:** BusinessValues IT-Service, DESY, DFN-CERT, FZ Jülich, KIT, FhG, LRZ, ParTec, RRZN, T-Systems Solutions for Research, Uni Dortmund

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Als Infrastruktur für das Management verteilter Daten im D-Grid-Verbund haben wir Stellaris für semi-strukturierte Daten auf Basis des Resource Description Frameworks (RDF) und das regelbasierte iRODS-Datenmanagementsystem des San Diego Supercomputing Centers für unstrukturierte Daten entwickelt, installiert, evaluiert, erweitert und für die Nutzer betrieben.

### WISSGRID – GRID FÜR DIE WISSENSCHAFT

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/wissgrid](http://www.zib.de/CSR/Projects/wissgrid)

**Mitarbeiter:** F. Schintke

**Partner:** Universitäten Göttingen, Wuppertal, Dortmund, Heidelberg, Köln, Trier; Astrophysikalisches Institut Potsdam, Staats- u. Universitätsbibliothek Göttingen, Universitätsmedizin Göttingen, AWI Bremerhaven, DESY, DKRZ, Inst. für Deutsche Sprache Mannheim

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Als D-Grid-Projekt hat sich WissGrid die nachhaltige Etablierung von organisatorischen und technischen Strukturen für den akademischen Bereich im D-Grid zum Ziel gesetzt. Dabei bündelt WissGrid die heterogenen Anforderungen aus verschiedenen wissenschaftlichen Disziplinen und entwickelt so konzeptionelle Grundlagen für die nachhaltige Nutzung der Grid-Infrastruktur sowie IT-technische Lösungen.

### DGSI – D-GRID SCHEDULER INTEGRATION

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/dgsi](http://www.zib.de/CSR/Projects/dgsi)

**Mitarbeiter:** M. Höggqvist

**Partner:** Universitäten Paderborn, Dortmund, Dresden, Heidelberg; GWDG, LRZ, Platform Computing, FhG SCAI, FhG FIRST, Bonn-Aachen Int. Center f. Information Tech.

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Das DGSI-Projekt beschäftigt sich mit der Interaktion und Kooperation zwischen autonomen Schemulern im Grid. Das Ziel ist die Verbesserung der Ressourcenauslastung und eine gerechtere Verteilung der Rechenzeit im D-Grid-Verbund. Dazu sollen Meta-Scheduler über zwei Delegationsmechanismen, der Aktivitäts-Delegation und der Ressourcen-Delegation, miteinander kooperieren. Soweit möglich werden in DGSI etablierte Standards verwendet.

### D-GRID KERNKNOTEN

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/dgrid\\_cluster](http://www.zib.de/CSR/Projects/dgrid_cluster)

**Mitarbeiter:** F. Schintke, M. Beick, M. Höggqvist, B. Kolbeck, D. Mauter, K. Peter, T. Steinke

**Partner:** div. Partner des D-Grid-Verbunds

**Forschungsförderung:** BMBF

**Inhalt:** Als Teil der deutschlandweiten D-Grid-Infrastruktur betreiben wir Speicher- und Rechenressourcen mit ca. 350 TByte Festplattenspeicher und 480 Rechenknoten, sowie Archivkomponenten zur Datensicherung auf Magnetbändern. Mit den vom BMBF geförderten Ressourcen wird erstmals in Deutschland eine einheitliche, gemeinsam nutzbare Rechenumgebung über sehr viele Standorte hinweg realisiert, die auch wir für unsere Simulationen und Praxistests verteilter und paralleler Anwendungen nutzen.

### METRIK – MODELLBASIERTE ENTWICKLUNG VON TECHNOLOGIEN FÜR SELBSTORGANISIERENDE DEZENTRALE INFORMATIONSSYSTEME IM KATASTROPHENMANAGEMENT

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/metrik](http://www.zib.de/CSR/Projects/metrik)

**Mitarbeiter:** J. Geibig, T. Röblitz

**Forschungsförderung:** DFG Graduiertenkolleg

**Inhalt:** Am METRIK-Graduiertenkolleg der Humboldt-Universität sind wir mit dem Forschungsthema „Selbstorganisierende Datenreplikation in drahtlosen Maschennetzwerken“ beteiligt. Dabei entwickeln wir verteilte Algorithmen, die selbst bei korrelierten Knotenausfällen (z.B. im Erdbebengebiet) die Verfügbarkeit wichtiger Daten garantieren.

### GRIDCHEM – GRID COMPUTING IN CHEMISTRY

**URL:** [www.zib.de/CSR/Projects/grid\\_chem](http://www.zib.de/CSR/Projects/grid_chem)

**Mitarbeiter:** T. Steinke, A. Reinefeld

**Partner:** ETH Zürich, University of Cambridge, Imperial College London, University of Copenhagen, FAU Erlangen-Nürnberg, Universidad de Sevilla

**Forschungsförderung:** European Science Foundation (ESF)

**Inhalt:** Wir sind an der Arbeitsgruppe „Computational Chemistry Workflows and Data Management“ (COST Action D37) beteiligt, organisieren Workshops und haben in unserer Funktion als STSM-Officer alle Anträge für Short-Term Scientific Missions (STSM) in der COST-Action D37 wissenschaftlich begutachtet.

**ABTEILUNG**

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG  
VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE  
OPTIMIERUNG  
WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION  
PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

 **SUPERCOMPUTING  
UND IT-SERVICE**

## DER HLRN-II SUPERCOMPUTER AM ZIB

**BEARBEITET VON:** Hubert Busch, Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Isaac Hailperin, Detlef Kehl, Bernd Kallies, Christian Schimmel, Manfred Stolle, Hinnerk Stüben, Thomas Steinke, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/HPC/serv](http://www.zib.de/HPC/serv)



Das ZIB betreibt im Rahmen des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen HLRN ein massiv-paralleles Supercomputersystem, das zu den leistungsfähigsten sowohl in Deutschland als auch weltweit gehört. In Verbindung mit wissenschaftlicher Fachberatung stellt dieses System eine zentrale Dienstleistung des ZIB für Wissenschaft und Forschung dar.

### DER HLRN-VERBUND

Der HLRN ist ein Zusammenschluss der sechs Bundesländer Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein.<sup>1</sup> Der Verbund fördert das Hoch- und Höchstleistungsrechnen durch die Bereitstellung von Hochleistungsrechner-Infra-

struktur. Neben dem Rechnerbetrieb hat der HLRN einen Kompetenzverbund für wissenschaftliches Rechnen aufgebaut, welcher in besonderer Weise die notwendige Zusammenarbeit von fachspezifischer Forschung, mathematischer Methodik und Informatik unterstützt und somit eine optimale Nutzung für die unterschiedlichen Wissenschaftsgebiete gewährleistet. Das ZIB ist ein Betreiberstandort für den HLRN-Supercomputer; der zweite Standort ist das RRZN der Universität Hannover.

### AUSBAU DES HLRN-II SYSTEMS IN 2009

In diesem Jahr wurde die zweite Ausbaustufe des Hochleistungsrechners HLRN-II in Betrieb genommen. Durch die Installation jeweils eines weiteren Rechnersystems an beiden Standor-

#### RECHNERSYSTEM JEWEILS MIT 4X DDR INFINIBAND-NETZWERK FÜR MPI UND DATEN-I/O

- ICE1: SGI Altix ICE 8200 Plus: 320 Knoten mit je 8 Prozessorkernen Intel Xeon Harpertown, Performance 30,7 TFlop/s, Hauptspeicher 5 TByte
- XE: SGI Altix XE: 48 Knoten mit je 8 Prozessorkernen Intel Xeon Harpertown, Performance 4,6 TFlop/s, Hauptspeicher 3 TByte
- ICE2: SGI Altix ICE 8200 Plus: 960 Knoten mit je 8 Prozessorkernen Intel Xeon Nehalem EP, Performance 90 TFlop/s, Hauptspeicher 45 TByte

#### FESTPLATTENSYSTEME

- Arbeitsspeicher: 810 TByte RAID 6 Festplattensysteme (2 globale Lustre-Dateisysteme à 405 TByte netto)
- H20 TByte RAID 6 Festplattensysteme für das
- Archivsystem mit einer Kapazität von derzeit 250 TByte (doppelt gespeichert) auf Magnetbändern einschließlich eines ca. 100 TByte großen Caches auf Festplatten.



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Das ZIB betreibt gemeinsam mit dem RRZN Hannover das verteilte Hochleistungsrechnersystem des HLRN, dem Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen. Im Jahr 2009 wurde die zweite Ausbaustufe des Rechnersystems installiert. In der Liste der 500 weltweit leistungsfähigsten Computer belegen die baugleichen HLRN-Systeme am ZIB und RRZN die Plätze 4 und 5 in Deutschland sowie weltweit die Plätze 39 und 40 ([www.top500.org](http://www.top500.org), November-Liste 2009).



Optische Kabel und wassergekühlte Türen. Allein die zweite Ausbaustufe hat 4.500 Kabelverbindungen mit einer Gesamtlänge von 45 km.

ten ist die gegenwärtige Rechenleistung auf das 45-fache des Vorgängersystems gestiegen. Die beiden Systemkomplexe in Berlin und Hannover belegen in der Liste der 500 weltweit leistungsfähigsten Computer mit einer jeweiligen Rechenleistung von über 100 TFlop/s die Plätze 4 und 5 in Deutschland sowie weltweit die Plätze 39 und 40.

Für das verteilte Rechnersystem wurde eine Systemsoftware zur Realisierung der „Ein-System-Eigenschaft“ entwickelt, die die zentrale Annahme von Rechenaufträgen und deren Verteilung und Abarbeitung auf beiden Teilsystemen ermöglicht. Durch replizierende Dateisysteme für Heimatverzeichnisse und Software-Installationen unterscheidet sich die Nutzung des verteilten Systems kaum von der eines Einzelsystems. Lediglich große Dateien (etwa >1 GByte) müssen an einem festen Standort gespeichert werden. Um eine hohe Datentransferrate zwischen den Standorten sicherzustellen, sind die beiden HLRN-Standorte durch eine vom DFN-Verein angemietete Glasfaserverbindung des Wissenschaftsnetzes mit einer Bandbreite von 10 Gbit/s miteinander verbunden.

### SYSTEMARCHITEKTUR DES HLRN-II

Die Auswahl der Systemarchitektur spiegelt die Anforderungen der Wissenschaftler wider. In beiden Ausbaustufen sind kleinere Teilsysteme für Programme vorgesehen, die bei moderater Parallelität einen großen gemeinsamen Hauptspeicher benötigen. Die Hauptkomponente ist in beiden Stufen ein massiv-paralleles Cluster-System für Programme mit hunderten bis tausenden parallelen Prozessen. Die Systeme werden von der Supercomputerfirma SGI geliefert und integriert. Die erste Ausbaustufe besteht pro Standort aus 48

Knoten vom Typ XE sowie 320 Knoten vom Typ ICE, die zweite Ausbaustufe besteht aus 960 Knoten vom Typ ICE. Im kommenden Jahr (2010) wird die zweite Ausbaustufe mit der Lieferung weiterer Maschinen vom Typ Ultra-Violet abgeschlossen. Diese haben die klassische SGI-Architektur, bei der mehrere TByte Hauptspeicher von einem einzelnen Prozess angesprochen werden können. Alle bisher installierten Knoten sind mit je zwei Quad-core-Prozessoren von Intel ausgestattet. Insgesamt sind pro Standort mehr als 10.000 Rechenkern mit insgesamt knapp 55 TByte Hauptspeicher installiert. Hinzu kommen Infiniband-Netzwerke und 830 TByte Festplattenkapazität. Eine Besonderheit der zweiten Ausbaustufe ist ein doppelt ausgelegtes (dual rail) Infiniband-Kommunikationsnetzwerk. Beide Ausbaustufen sind mit einem weiteren Infiniband-Netzwerk für die Ein- und Ausgabe großer Datenmengen auf die globalen Festplattensysteme ausgestattet. Zur Ausstattung am ZIB gehört außerdem ein Magnetband-Archivspeicher.

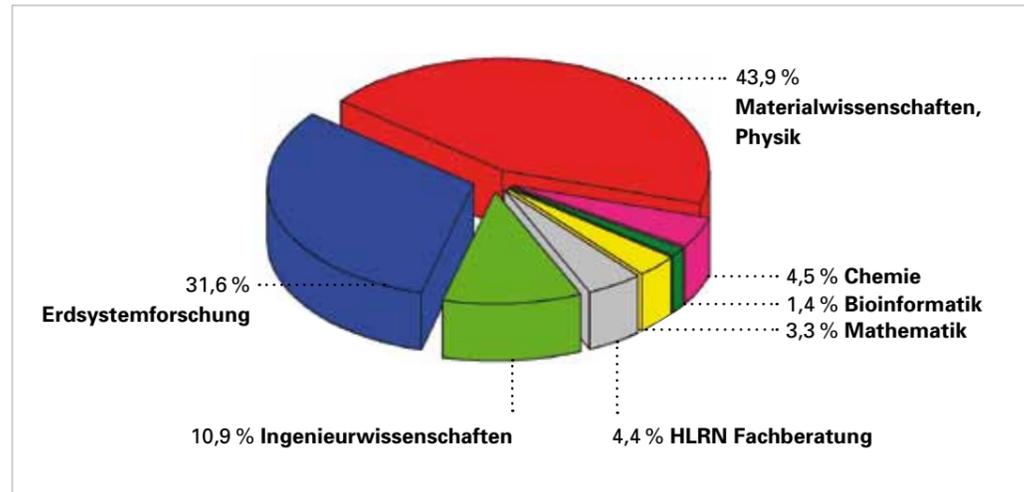
Die ICE-Systeme der beiden Ausbaustufen können auch als großes, inhomogenes System benutzt werden. Dies wurde von SGI bei der Ausführung des Linpack-Benchmarks für die Top500-Liste ausgenutzt, bei dem das System eine Effizienz von 89% lieferte. Im Regelbetrieb werden Rechenaufträge aber auf homogenen Partitionen ausgeführt.

<sup>1</sup> [www.hlrn.de](http://www.hlrn.de)

## HLRN-FACHBERATUNG UND SUPERCOMPUTING

**BEARBEITET VON:** Hubert Busch, Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Isaac Hailperin, Detlef Kehl, Bernd Kallies, Christian Schimmel, Manfred Stolle, Hinnerk Stüben, Thomas Steinke, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny

**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** [www.zib.de/HPC](http://www.zib.de/HPC)



Das Wissenschaftliche Hochleistungsrechnen gewinnt für zahlreiche naturwissenschaftliche Forschungsgebiete immer mehr an Bedeutung. Die Durchführung großskaliger Computersimulationen bietet eine kostengünstige und häufig schneller realisierbare Alternative zu teuren und zeitraubenden Experimenten. Als Dienstleistung für Wissenschaft und Forschung stehen dafür am ZIB der HLRN-II-Supercomputer (Komplex Berlin) und eine Nutzerberatung durch promovierte Wissenschaftler – die Fachberater – zur Verfügung.

### HLRN-FACHBERATUNG

Heutige Hochleistungsrechner besitzen, verglichen mit den früheren Vektorrechnern, eine weitaus komplexere Systemarchitektur mit bis zu hunderttausend Einzelprozessoren, einem schnellen Kommunikationsnetzwerk und einem ausgewogen konfigurierten System paralleler Ein-/Ausgabekanäle. Für die Supercomputer-Nutzer wird es daher immer schwieriger, ihre Programmcodes, die ihrerseits auch im-

mer komplexer werden, stets an den neuesten Stand der Hardware und Systemsoftware anzupassen. Hier setzt unser Fachberaterkonzept an, das jedem Nutzer unserer Supercomputer einen Fachberater des jeweiligen Gebiets oder eines verwandten Faches zur Seite stellt. Die Fachberater unterstützen die Anwender in allen Fragen der Supercomputer-Nutzung.

Am HLRN werden zahlreiche Projekte aus den Wissenschaftsdisziplinen Chemie, Physik, Erdsystemforschung und Ingenieurwissenschaften betreut. Erstmals konnten 2009 auch Projekte aus dem Bereich der mathematischen Optimierung realisiert werden. Die Fachberater installieren und pflegen fach- und systemspezifische Softwarewerkzeuge und unterstützen bei der Optimierung, Parallelisierung und Portierung der Anwendercodes. Darüber hinaus bilden sie wissenschaftliche Nachwuchskräfte in diesen Disziplinen aus und arbeiten eng mit den Systembetreibern und Informatikern im Hause zusammen.

### AUSWAHL VON GROSSPROJEKTEN AUF DEM HLRN-II SYSTEM

- **Physik:** Probing the finite temperature phase transition with O (a) improved Wilson fermions at realistic quark masses, Uni Hamburg und DESY
- **Erdsystemforschung:** Numerische Simulation zur Wechselwirkung der Atmosphäre mit der Tragflügelumströmung, Uni Hannover
- **Physik:** Lattice QCD close to and at the physical pion mass, Uni Hamburg und DESY
- **Physik:** Growth of ferroelectric thin films on SrTiO<sub>3</sub>, HU Berlin
- **Erdsystemforschung:** Turbulenzstruktur in der urbanen Rauigkeitsschicht: LES-Referenzstudien und Vergleiche mit Windkanal-, Skalenmodell- und Feldmessungen, Uni Hannover
- **Physik:** 3D radiation transport, Uni Hamburg



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Das ZIB ist seit den achtziger Jahren Zentrum für Supercomputing in Deutschland. Seit dem Jahr 2002 betreibt das ZIB Supercomputer im Rahmen des HLRN-Verbunds. In den Supercomputing-Aktivitäten spielt die Fachberatung eine zentrale Rolle. Die Beratung erstreckt sich auf alle Fragen der Supercomputer-Nutzung. Schwerpunkte sind die Portierung, Parallelisierung und Optimierung von Programmcodes sowie die Aus- und Weiterbildung der Nutzer.

- **Erdsystemforschung:** Large Eddy Simulation of the Surface Boundary Layer for Wind Energy Applications, Uni Hannover
- **Mathematik:** Lösung großer Probleme der gemischt ganzzahligen Programmierung, ZIB Berlin
- **Ingenieurwissenschaften:** Numerische Analyse der hydrodynamischen Stabilität von Kristallschmelzen während der Züchtung oxidischer Kristalle, HU Berlin.
- **Erdsystemforschung:** Auswirkungen des Klimawandels auf die Zirkulation des Atlantischen Ozeans, Uni Kiel und IFM-GEOMAR

### EFFIZIENTE NUTZUNG DER SYSTEMARCHITEKTUR

Die Installation der zweiten Ausbaustufe, ein ICE2-System mit Intel-Nehalem-Prozessoren mit NUMA-Eigenschaft (Non-Uniform Memory Access), stellte für die Fachberatung eine neue Herausforderung dar. Um die theoretisch gegenüber der ICE1 dreifach höhere Hauptspeicherbandbreite im realen Betrieb nutzen zu können, ist die Herstellung von Prozessor- und Speicheraffinität erforderlich.

Entsprechende Erfahrungen wurden bereits auf dem HLRN-I mit IBM-POWER4-Prozessoren gesammelt. Im Allgemeinen kann die Prozessor- und Hauptspeicheraffinität transparent über die Prozessverwaltung der verwendeten MPI-Bibliothek realisiert werden. Wir haben einen Algorithmus entwickelt, der für übliche MPI-Anwendungen eine günstige Affinitätsmaske bestimmt, die von der aktuell auf einem Knoten durch das BIOS vorgegebenen Core-Nummerierung unabhängig ist. Dieser Algorithmus wird auch auf den ICE1- und XE-Systemen zur besseren Handhabung der gemeinsamen L2-Caches der Harpertown-Prozessoren verwendet.

Am HLRN haben wir das Verfahren in die Nutzerumgebung integriert, um geeignete Standardeinstellungen für die Prozessor- und Hauptspeicheraffinität vorzugeben und die Nutzung der heterogenen gewordenen HLRN-Hardware zu vereinfachen. Zusätzlich haben wir den Algorithmus in die Open-Source-MPI-Bibliothek MVAPICH2 integriert, um heterogene Cluster unterstützen zu können. Diese Affinitätsstrategie wird in künftigen Releases dieser Software der MPI-Community zur Verfügung stehen.<sup>1</sup>

Fachberater des ZIB bei einer Ausbildungsveranstaltung des HLRN an der TU-Harburg



Eine analoge Erweiterung der SGI-proprietären MPI-Bibliothek MPT haben wir dem Hersteller vorgeschlagen. Für die Hybrid-Codes CPMD, VASP, und BQCD haben wir auch ein Affinitätschema für die OPENMP-Threads eines MPI-Tasks implementiert und für die HLRN-Nutzer verfügbar gemacht.<sup>2</sup>

Mit Installation der ICE2-Systeme stieg die Anzahl der verfügbaren Rechenknoten auf das 3,6-fache. Um die Skalierung des Batchsystems zu gewährleisten und die neuen Knoten in das Batchsystem zu integrieren, waren Konfigurationsarbeiten notwendig, die ebenfalls von der HLRN-Fachberatung am ZIB vorgenommen wurden. Das bereits bestehende Nutzungskonzept wurde um eine Auftragschlange erweitert, die die ICE2 höher skalierenden Anwendungen unter Verwendung von mindestens 16 Knoten (128 cores) vorbehält, während die ICE1 vorrangig für moderat skalierende Anwendungen von mindestens 4 Knoten (32 cores) bis max. 64 Knoten (512 cores) vorgesehen ist.<sup>3</sup>

Dadurch konnte ein guter Durchsatz mit moderaten Wartezeiten in den Warteschlangen auch für Jobs mit hohen Ressourcenanforderungen erreicht werden. Seit der Inbetriebnahme der ICE2 wurde ca. 50% der Leistung an Jobs abgegeben, die weniger als drei Stunden warten mussten, während die Auslastung mit 80% über der von den HLRN-Gremien geplanten Maximalkapazität lag. 70% der auf den ICE2 abgegebenen Jobs forderten mehr als 64 Knoten pro Job an und waren damit entsprechend der Batchsystem-Konfiguration nur auf den ICE2-Systemen lauffähig.

<sup>1</sup> <http://mvapich.cse.ohio-state.edu/download/mvapich2/changes.shtml> <sup>2</sup> [www.hlrn.de/home/view/System/PlaceMe](http://www.hlrn.de/home/view/System/PlaceMe)

<sup>3</sup> [www.hlrn.de/home/view/System/BatchSystem](http://www.hlrn.de/home/view/System/BatchSystem)

## IT-SERVICE

**BEARBEITET VON:** Wolfgang Pyszkalski, Stefan Düring, Rainer Wesel  
**WEITERE INFORMATIONEN UNTER:** <http://its.zib.de/Mitarbeiter>



Unser IP-Datennetz stellt mit 1.458 Gigabit Ethernet Ports in den Netzkomponenten für jeden Arbeitsplatz im ZIB die erforderliche Zahl von Anschlüssen mit der Geschwindigkeit von einem Gigabit zur Verfügung. Im Bereich der Server und Außenanbindungen stehen im Netz Anschlüsse mit einer Geschwindigkeit von 10 Gigabit/s über OM3 Lichtwellenleiter zur Verfügung. Zwei Switches mit 88 Ports vom Typ 10 GE FCoE und 24 Fibre Channel Ports verbinden das IP-Netz mit dem Fibre Channel Speichernetzwerk (SAN).

Über das Speichernetzwerk mit seinen 576 Ports sind derzeit 29 Server mit 1.814 Platten in 22 Arrays verbunden. Einige der Server, die Plattenkapazität über IP-Protokolle bereitstellen, sind über das Speichernetzwerk zusätzlich mit den Bandrobotern verbunden, die mit 38 Laufwerken auf 12.400 Bänder zugreifen.

Die Wärmeabgabe ist neben der Frage des Umweltschutzes auch eine technisch nicht zu vernachlässigende Größe. Da wir die neuen Systeme selber installieren, prüfen wir auch, ob sich die

Die Abteilung IT-Service plant, beschafft, installiert und wartet die gesamte IT-Infrastruktur im ZIB. Durch die enge Kooperation mit führenden Herstellern besitzt die Abteilung Zugriff auf neueste Produkte und kann diese teilweise bereits vor der Markteinführung unter praxisnahen Bedingungen evaluieren. Die Ergebnisse kommen nicht nur den Herstellern zugute, sondern dienen auch der Planung zukünftiger Erweiterungen der IT-Infrastruktur am ZIB, das dadurch häufig eine Vorreiterrolle bei der Einführung neuer Technologien spielt. Unsere aktuellen Erkenntnisse bringen wir zeitnah in die Lehre ein. In Zusammenarbeit mit der Hochschule für Wirtschaft und Recht in Berlin (HWR) bieten wir Ausbildungsplätze für die Fachrichtung Informatik mit dem Vertiefungsschwerpunkt Systemadministration an.

Das erworbene Wissen vermitteln wir auch in unseren Veranstaltungen. Um die Förderung des Austausches zwischen den IT-Diensten wissenschaftlicher Einrichtungen bemüht, organisieren wir als Plattform für diesen Zweck regelmäßig gut besuchte Veranstaltungen, bei denen jeweils etwa die Hälfte der Zeit für Gastvorträge anderer wissenschaftlicher Einrichtungen vorgesehen wird.

### IP-NETZWERK

Neben der zentralen Datenhaltung sind Daten- und Speichernetzwerke ein besonderer Schwerpunkt unserer Aktivitäten. Während alle Arbeitsplätze ausnahmslos mit Gigabit Ethernet (GE) versorgt sind, ist unser IP-Netz im Bereich der Server und Außenanbindungen auf 10 GE ausgelegt. Durch die dabei verwen-



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Die Abteilung IT-Service plant, beschafft, installiert und wartet die gesamte IT-Infrastruktur im ZIB. Durch die enge Kooperation mit führenden Herstellern, insbesondere mit den Firmen Sun Microsystems und LSI Logic Corporation, ist die Abteilung in der Lage, neueste Produkte teilweise bereits im Prototypstadium unter praxisnahen Bedingungen am ZIB zu testen und so zur Verbesserung der Produkte beizutragen. Im Jahr 2008 ist die Abteilung als „Sun Center of Excellence für Daten- und Speichermanagement“ ausgezeichnet worden.

thermische Belastung innerhalb eines Systemschranks in den erwarteten Grenzen bewegt.

Die Bilder zeigen die Vermessung eines Plattenschranks mit einer Wärmebildkamera, deren Messwerte anschließend mit entsprechender Software visualisiert werden.



dete Technik eines Virtual Switching Systems (VSS) arbeiten die beiden räumlich entfernt aufgestellten zentralen Router wie ein physikalisches System. Dies erhöht nicht nur die Ausfallsicherheit, sondern verdoppelte bei der Einführung die Bandbreite im Backbone des ZIB durch permanente Nutzung der bisher nur im Fehlerfall aktiven redundanten Verbindungen. Durch die Einsparung der bisher verwendeten Protokolle wie HSRP (Hot Standby Router Protokoll) erfolgt bei Ausfall der aktiven Supervisor Engine eines Routers die automatische Umschaltung auf die Engine des anderen Routers jetzt so schnell, dass die meisten aktiven Verbindungen unterbrechungsfrei weiterarbeiten können.

### SPEICHERNETZWERK

Grundlage für den Zugriff unserer Server auf den Plattenspeicher und das Bandarchiv ist ein sehr leistungsfähiges Speichernetzwerk auf der Basis von Fibre Channel (FC SAN), das mit 4 und 8 Gb/s pro Verbindung arbeitet. Ähnlich der Funktion eines IP-Datennetzes, vermittelt das FC-Netz den Austausch von Daten zwischen den Geräten, wobei ausschließlich SCSI Befehle übertragen werden. Das Netzwerk regelt die Zugriffsrechte zwischen den Endgeräten, wobei durch Änderung der Konfigurationsregeln auf Kommandoebene in den Plattenspeichern vorhandene virtuelle Volumes flexibel zur Nutzung durch die Server bereitgestellt werden können. Durch Bündelung von Anschlüssen pro Endgerät erzielen wir in einigen, für maximale Bandbreite ausgelegten Segmenten, bis zu 3 GByte pro Sekunde als aggregierte Bandbreite beim Schreiben auf den Plattenspeicher.

### IP- UND SPEICHERNETZWERK WACHSEN ZUSAMMEN

Die beiden Welten unseres IP-Netzwerkes und des Fibre Channel Speichernetzwerkes (FC SAN) haben wir durch Einsatz von Netzkomponenten verbunden, die momentan hauptsächlich als 10 GE IP-Switch arbeiten, bei denen aber jeder der 10 GE-Ports auch mit dem Protokoll FCoE (Fibre Channel over Ethernet) arbeiten kann. Da jeder Switch sowohl über 10 GE mit dem IP-Netz, als auch über zusätzliche FC-Ports mit dem SAN verbunden ist, kann ein Server mit entsprechender Adapterkarte über eine Verbindung gleichzeitig FC und IP nutzen. Der Switch vermittelt die Pakete dann jeweils in das IP- oder FC-Netz. Momentan sind die Arbeiten mit dieser Technik eine Investition in die Zukunft, in der die Welten von IP, Fibre Channel und Infiniband womöglich in einem einzigen Netzwerk auf der Basis von Ethernet zusammenwachsen.

### UMWELTSCHONENDE IT

Jede von uns eingesetzte Technik beurteilen wir nicht nur nach der Leistung, sondern auch nach ihrem Stromverbrauch und der Wärmeabgabe. Da diese Werte jedoch bei Speicher- und Rechnersystemen sehr stark von Art und Umfang der Nutzung abhängen, betreiben wir einen hohen Aufwand in Form von Echtzeitmessungen des Stromverbrauches der einzelnen Geräte und einer flächendeckenden Messung der Wärmeabgabe. Dies bietet nicht nur die Möglichkeit von Langzeitanalysen als Grundlage weiterer Planungen, sondern soll in Zukunft auch die Option eines möglichst noch umweltschonenderen Betriebes der IT-Komponenten im ZIB eröffnen.

## ZENTRALE DATENHALTUNG IM ZUSE-INSTITUT BERLIN

BEARBEITET VON: Wolfgang Pyszkalski, Dirk Krickel, The Anh Pham  
WEITERE INFORMATIONEN UNTER: <http://its.zib.de>



Das Bild zeigt einen der Gänge im Bandarchiv, in dem auf den Seiten die Bandkassetten in Fächern abgelegt sind. Der Transport der Kassetten von ihren Fächern zu den im Hintergrund erkennbaren Bandlaufwerken erfolgt durch Roboter.

Das Bandarchiv befindet sich in einem Tresorraum, der auch extremer Hitze mehrere Stunden lang widerstehen kann, ohne dass sich im Innenbereich eine für die Magnetbänder kritische Temperatur entwickelt. Im Alarmfall wird der Tresor automatisch versiegelt und vollständig mit Löschgas geflutet.

Nach den Menschen sind die im ZIB gelagerten Daten praktisch das wichtigste Gut. Entsprechend hoch ist der von uns betriebene Aufwand in Bezug auf Sicherheit, Geschwindigkeit und Kapazität der zentralen Datenhaltung.

Der Bedarf an Speicherkapazität wächst exponentiell, so dass die Strategie einer beständigen Erweiterung der Plattenkapazitäten kein zukunftsweisendes Konzept darstellt. Insbesondere der damit zunehmende Verbrauch von Strom setzt hier Grenzen. Dies um so mehr, als die bei Weitem überwiegende Zahl der Daten nur relativ selten gelesen wird. Eine stromsparende Möglichkeit zur Speicherung selten benutzter Daten ist die Ablage auf Magnetbändern. Strom wird immer nur dann verbraucht,

wenn Daten gelesen oder neu geschrieben werden. Dieses Verfahren ist nicht nur kostengünstig, sondern stellt auch einen schonenden Umgang mit der Umwelt dar.

### ENERGIESPARENDE SPEICHERHIERARCHIE

Das Grundprinzip unserer zentralen Datenhaltung besteht deshalb aus einem mehrstufigen Speicherkonzept mit einem Verbund aus Platten- und Bandspeicher. Die zentralen Server der Datenhaltung ermöglichen Anwendern auf verschiedenen technischen Wegen Zugriff auf zur Zeit etwa 1 Petabyte Plattenspeicher. Ohne Aktion der Anwender werden neue Daten kontinuierlich von dem Plattenspeicher in das Bandarchiv kopiert, wobei immer zwei Kopien auf verschiedene Bänder geschrieben werden. So-



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Für die Arbeiten im ZIB und zur Nutzung durch andere wissenschaftliche Einrichtungen<sup>1</sup> betreiben wir ein modernes Speichersystem. Unsere Server ermöglichen den Zugriff auf etwa ein Petabyte<sup>2</sup> Plattenspeicher. Als Erweiterung des Plattenspeichers dient ein Bandarchiv zur Langzeitspeicherung. Dieses Archiv ist ein „Hochregallager“ für Bandkassetten, die auf Anforderung der Server durch Roboter in die Bandlaufwerke geladen werden. Die Server sorgen automatisch dafür, dass sich auf dem Plattenspeicher immer die aktuell benutzten Daten befinden, wodurch er den Anwendern praktisch als unendlich groß erscheint.

Eine Migration von Daten erfolgte zuletzt Q4 2009, bei dem in 4 Wochen 1.325 Bänder mit 300 TB von SGI/DMF/Powderhorn/T9940B nach Sun/SAM-FS/SL8500/T10000B migriert wurden. Dies erforderte nicht nur ein einfaches Umkopieren, sondern auch den grundlegenden Wechsel über mehrere Technologien und Formate.

Es ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeit dieser Migration außerordentlich hoch war. Aber wir waren nicht nur schnell, sondern haben auch durch doppelte Berechnung von Prüfsummen dokumentiert, dass die Daten im Ziel wirklich absolut unverändert angekommen sind.

bald der Platz auf dem Plattenspeicher knapp wird, erfolgt automatisch eine Löschung lange nicht benutzter Daten auf den Platten, wobei die Verwaltungsdaten erhalten bleiben. Ein Anwender hat also den Eindruck, dass alle seine jemals erzeugten Daten auf den Platten liegen. Wenn auf eine so ausgelagerte Datei zugegriffen wird, laden die Server die entsprechenden Daten automatisch aus dem Bandarchiv auf die Platten zurück.

### KOOPERATIONEN MIT HERSTELLERN

Für die einzelnen Komponenten unserer Datenhaltung nutzen wir etablierte Software und Technik höchster Qualität. Durch unser Gesamtkonzept, spezielle Konfigurationen und einige Zusätze erreichen wir jedoch mehr Leistung und Sicherheit, als die einzelnen Komponenten standardmäßig bieten. Der Grad unserer Fähigkeiten spiegelt sich nicht zuletzt in dem Zustandekommen einer Kooperation unter dem Titel „Sun Center of Excellence Daten- und Speichermanagement am Zuse-Institut Berlin“, sowie einer Reihe formloser Zusammenarbeiten zum gegenseitigen Nutzen mit weiteren Herstellern wider. Dadurch, dass uns Hersteller neueste, noch nicht auf dem Markt verfügbare Produkte und technische Dokumentationen zur Verfügung stellen, können wir Verfahren und Musterlösungen entwickeln, die einerseits die Datenhaltung im ZIB ständig verbessern, andererseits aber auch für die Hersteller und deren eigenen Entwicklungen interessant sind.

### EWIGE SPEICHERUNG VON DATEN

Eine zunehmende Rolle spielt die Speicherung von unwiederbringlichen Daten, wie z.B. Ergebnisse von Messungen aus physikalischen Experimenten, digitalisierte Ansichten archäologischer Artefakte und Dokumente. Für sol-

che Daten nutzen wissenschaftliche Einrichtungen im Rahmen von Kooperationen unsere Infrastruktur. Dafür stellen wir ihnen auf leistungsstarken Servern virtuelle Rechner zur Verfügung, über die sie Zugriff auf Kapazitäten unserer Datenhaltung haben. Wir stellen eine bitgenaue Reproduzierbarkeit der Daten sicher, ohne uns um deren Inhalte zu kümmern. Auch ein durch die ständige Weiterentwicklung bedingter Wechsel der zu Grunde liegenden Technik und das dadurch notwendigen Migrieren von Daten erfolgt durch uns.

### SCHUTZ UNWIEDERBRINGLICHER DATEN

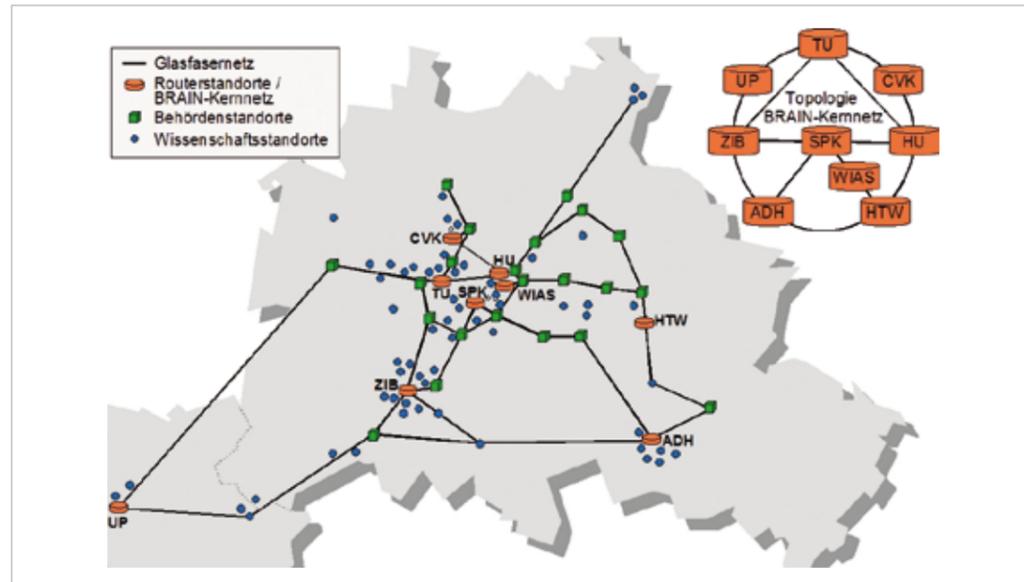
Ein nicht zu unterschätzendes Problem bei der Lagerung von Bändern ist eine Alterung des Materials. Unser Ziel ist es, sich anbahnende Probleme so frühzeitig zu erkennen, dass wir die Lesbarkeit der Daten unabhängig vom Grad der Nutzung über beliebige Zeiträume garantieren können. Dazu verfügen wir über die Möglichkeit, Probleme beim Schreiben und Lesen auf Bänder zu erkennen, die als physikalisch bedingte, normale Ereignisse immer mal wieder auftreten. Entsprechend werden solche Ereignisse im Normalfall nicht an die Server gemeldet. Gleichwohl gibt es bei Problemen mit dem Bandmaterial grenzwertige Situationen, wo eine Vielzahl solcher Ereignisse auf ein sich anbahnendes Problem hindeutet. Wirkungslos wäre diese Technik natürlich bei Bändern, die lange Zeit nicht gelesen wurden. Bänder der langfristigen Datenhaltung lesen wir deshalb außerhalb der normalen Anforderungen mittels einer speziellen Überwachung regelmäßig zur Probe. Wenn dabei die erwähnten Fehler auftreten, erfolgen entsprechende Alarme, damit wir über das weitere Vorgehen entscheiden und das Band gegebenenfalls rechtzeitig vor dem Auftreten echter Probleme umkopieren können.

<sup>1</sup> Wissenschaftlichen Einrichtungen wird im Rahmen von Kooperationen die Möglichkeit geboten, das Langzeitarchiv über unsere Datennetze zu nutzen. Insbesondere im Bereich der im Prinzip ewigen Speicherung von ansonsten unwiederbringlichen Daten wird diese Möglichkeit zunehmend genutzt. <sup>2</sup> Wenn man, um eine Vorstellung von den Datenmengen zu erhalten, 1 Byte (einen Buchstaben) als eine Sekunde annimmt, entspricht ein Petabyte fast 36 Millionen Jahren.

# BRAIN – DAS BERLINER WISSENSCHAFTSNETZ

BEARBEITET VON: Hubert Busch, Ursula Droebe, Marek Fröhlich, Stefan Wollny

WEITERE INFORMATIONEN UNTER: [www.zib.de/brain](http://www.zib.de/brain)



BRAIN<sup>1</sup> vernetzt aktuell 142 Standorte von 44 wissenschaftlichen, kulturellen oder Bildungseinrichtungen mit Sitz im Land Berlin und Potsdam über das landeseigene Glasfasernetz. Auf dieser Grundlage wird den Teilnehmern am BRAIN ein Hochgeschwindigkeits-Datennetz in MPLS<sup>2</sup>-Ethernet-Technik (BRAIN-Verbundnetz), sowie Glasfasern und Bandbreiten zur dedizierten Nutzung, z.B. zur Verbindung einzelner Standorte, bereitgestellt. Für den Betrieb des X-WiN<sup>3</sup> in Berlin erhält der DFN-Verein Fasern aus dem BRAIN zur Verfügung stehenden Glasfaser-Kontingent.

## VERBUNDNETZ

Das BRAIN-Verbundnetz besteht aus dem ringförmigen<sup>4</sup> Kernnetz mit zusätzlichen Querverbindungen zwischen den Netzknoten und den Zugangsleitungen für Einrichtungen, die über Ethernet angebunden sind. Neun über Berlin

und Potsdam verteilte Netzknoten und deren Verbindungen untereinander bilden das Kernnetz. Jeder Netzknoten ist mit zwei bis vier anderen Netzknoten verbunden. Dies gewährleistet den unterbrechungsfreien Betrieb auch während eines Leitungsschadens an einer beliebigen Stelle im Kernnetz. Über das BRAIN-Verbundnetz erfolgt der institutsinterne Datenaustausch einer Einrichtung zu ihren abgesetzten Standorten über eigenständige und abgesicherte virtuelle Verbindungen (VLAN,<sup>5</sup> VPLS<sup>6</sup>). So werden Netze geschaffen, die logisch sowie vom kundenseitigen Administrationsaufwand einem einfachen LAN entsprechen, sich geographisch jedoch über Berlin bzw. Potsdam erstrecken können. Darüber hinaus wird der regionale IP-Verkehr der Teilnehmer untereinander mit hoher Geschwindigkeit, unabhängig von ihrem derzeitigen Internetanschluss, ausgetauscht. Ist der Internet-An-

## BRAIN-KERNNETZ

Das BRAIN-Kernnetz besteht aus neun MPLS-fähigen Netzknoten und deren Verbindungen untereinander. Die ringförmige Struktur des Kernnetzes und die Unabhängigkeit der Netzknoten voneinander sind die Grundlage für die hohe Verfügbarkeit der angebotenen Dienste.

## MPLS

Das Multi-Protokoll Label Switching ermöglicht die verbindungsorientierte Übertragung von Datenpaketen in einem verbindungslosen Netz entlang eines zuvor aufgebauten Pfades (Label-Switched Path, LSP). Die erforderliche Dienstgüte (Quality of Service, QoS) beispielsweise für Telefonie oder Multimedia-Anwendungen, kann bereits bei der Signalisierung eines LSP von den beteiligten Netzknoten bereitgestellt werden. Dienstgütemerkmale wie geringe Latenz, feste reservierte Bandbreiten und Priorisierung der Datenpakete sind für jeden LSP separat konfigurierbar.

## VPLS

Die logische Zusammenschaltung der Standortanschlüsse einer Einrichtung zu einem Virtual-Private LAN Segment ist ein wesentliches Merkmal



**DAS PROJEKT IN KÜRZE:** Seit 1994 dient BRAIN den Hochschulen, Forschungsinstituten, Bildungs- sowie anderen öffentlichen Einrichtungen in Berlin als Hochgeschwindigkeitsdatennetz. Grundlage ist das landeseigene Glasfasernetz, das in enger Zusammenarbeit mit dem IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ) zur gemeinsamen Nutzung von Wissenschaft und Verwaltung stetig weiter ausgebaut wird. BRAIN nutzt hiervon 2000 km Einzelfaser und bietet regionalen Wissenschaftseinrichtungen leistungsstarke Kommunikationsverbindungen untereinander, Zugang zum Berliner Landesnetz (BeLa) und die Anbindung an das Internet über das Deutsche Forschungsnetz (DFN).

des BRAIN-Verbundnetzes. Innerhalb des VPLS sind die in der Stadt verteilten Standorte der Einrichtung über „virtuelles“ Ethernet (Layer2) verbunden. Die einzelnen für jede Einrichtung im Kernnetz aufgespannten VPLS sind völlig voneinander separiert.

## FAST-ReROUTE

Zur Absicherung der Datenströme in einem MPLS-Netzwerk werden neben den primären LSP redundant verlaufende Backup-LSP signalisiert. Kommt es zu einer Unterbrechung des primären LSP werden sämtliche durch diesen LSP verlaufenden Datenströme über den Backup-LSP zum Ziel geleitet. Dieses Umschwenken der Datenströme (Fast-ReRoute) geschieht üblicherweise in weniger als 50 ms nach dem Ausfall des primären LSP.

## WDM

Wavelength Division Multiplexing ermöglicht den Transport hochbitratiger (bis zu 10Gbit/s) Datenströme über bis zu 40 parallelen Kanälen unterschiedlicher Wellenlängen in einem optischen Leiter (Glasfaser).

schluss einer Einrichtung über das X-WiN des DFN-Verein realisiert, kann im Fall und für die Dauer einer Störung dieses Anschlusses der Internetverkehr über das BRAIN-Verbundnetz geführt werden. Für Teilnehmer, die einen DFN-Portanschluss<sup>7</sup> nutzen, kann das BRAIN-Verbundnetz als Zuleitung zum DFN-Router im ZIB genutzt werden. Ein weiterer BRAIN-Dienst für Verbundnetzteilnehmer ist der lesende Web-Zugriff auf Daten innerhalb des Berliner Landesnetzes (BeLa). Da seit Anfang 2006 Verwaltungsanordnungen des Berliner Senats nur noch im BeLa Online verfügbar sind, betreibt BRAIN einen eigenen HTTPS<sup>8</sup>-Proxy für den Web-Zugriff auf die im BeLa bereitgestellten Inhalte. Derzeit wird dieser Dienst von mehr als 200 Mitarbeitern in den Verwaltungen der Wissenschaftseinrichtungen genutzt – Tendenz steigend.

## GLASFASER-KONTINGENT

Aus dem landeseigenen Glasfasernetz steht BRAIN ein Kontingent von 2.000 km Einzelfasern zur Verfügung; dieses Kontingent wird seit 2005 voll genutzt. BRAIN verwendet auf aktuell 263 km Einzelfasern WDM<sup>9</sup>-Technik, um trotz Faserknappheit weitere Dienste über bereits bestehende Glasfaser-Verbindungen zu realisieren. Ohne Einsatz von WDM-Technik würden weitere 1.333 km Einzelfaser benötigt.

## MANAGEMENT UND SERVICE

Sämtliche aktive Netzkomponenten (Netzknoten, Switches und WDM-Geräte) werden zentral von der BRAIN-Geschäftsstelle aus administriert und überwacht. Hierfür wird überwiegend Open-Source und am ZIB entwickelte Individualsoftware eingesetzt, die sich über Jahre bewährt hat. Der aktuelle Status des Kernnetzes kann über das Internet unter [www.brain.de/netzstatus](http://www.brain.de/netzstatus) eingesehen werden. Zu den ständigen Aufgaben des zentralen BRAIN-

Netzwerkmanagements gehören das Schalten und die Inbetriebnahme neuer Glasfaser-Verbindungen, die Fehlersuche, Fehleranalyse und ggf. Fehlerbehebung innerhalb der Anbindungen der Standorte sowie insbesondere auch die Beratung der Einrichtungen in allen Fragen der Anbindung von entfernten Standorten an das BRAIN.

## DIE NEUEN NETZKNOTEN

Im Berichtsjahr wurde eine europaweite Ausschreibung zur Ersatzbeschaffung der aktuellen Netzknoten durchgeführt. Die neue Technik unterstützt alle Funktionen des bisherigen BRAIN-Verbundnetzes, ist zusätzlich 10 Gigabit-Ethernet-fähig, unterstützt IPv6<sup>10</sup> und bietet erweiterte Möglichkeiten der Verkehrsflusssteuerung für einzelne Klassen von Datenströmen, beispielsweise für Telefonie und Multimedia. Seit Ende 2009 werden Tests mit den beschafften Geräten durchgeführt; die Inbetriebnahme wird im ersten Quartal 2010 erfolgen.

## NETZERWEITERUNG UND PROJEKTE

Wie in den Vorjahren wurde auch 2009 in Zusammenarbeit mit BRAIN das Glasfasernetz des Landes Berlin durch Baumaßnahmen erweitert. Die neu erschlossenen Standorte sind das Deutsche Archäologische Institut mit seinen zwei Standorten in Berlin-Dahlem, die Stiftung Deutsche Kinemathek mit dem Museum für Film und Fernsehen und dem Filmmuseum, das Institut für Ökologie und Biologie der Technischen Universität und das Museum für Fotografie der Stiftung Preussischer Kulturbesitz. Weiterhin stellt BRAIN seit 2009 im Rahmen zweier D-GRID<sup>11</sup>-Projekte zwischen dem ZIB und der Charité (MediGRID) und dem ZIB und dem Astrophysikalischen Institut Potsdam (AstroGRID) die physikalische Infrastruktur zwischen den Standorten zur Verfügung.

<sup>1</sup> BRAIN: Berlin Research Area Information Network <sup>2</sup> MPLS: Multi-Protokoll Label Switching <sup>3</sup> X-WiN: Bundesweite Netzinfrastruktur des DFN-Vereins u. a. für den DFN-Internet-Dienst <sup>4</sup> Bei der Vernetzung in Ring-Topologie werden jeweils zwei Netzknoten so miteinander verbunden, dass ein geschlossener Ring entsteht. <sup>5</sup> VLAN: Virtual Local Area Network <sup>6</sup> VPLS: Virtual Private LAN Segment

<sup>7</sup> DFN-Portanschluss: Bei dieser Art des X-WiN-Zugangs (<= 75 Mbit/s) muss die nutzende Einrichtung die Zuleitung zu einem DFN-Router selbst stellen.

<sup>8</sup> HTTPS: Protokoll zur gesicherten Kommunikation mit Web-Servern <sup>9</sup> WDM: Wavelength Division Multiplexing: Simultane Übertragung von hochbandbreitigen Signalen über optische Verbindungen (Glasfaser) <sup>10</sup> IPv6: Nachfolger des gegenwärtig im Internet verwendeten Internet-Protokolls IP Version 4 (IPv4) <sup>11</sup> D-Grid: [www.d-grid.de](http://www.d-grid.de)

# FAKTEN UND ZAHLEN

---

MEHR ALS „NUR“ WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG –  
VERANSTALTUNGEN DES ZIB FÜR KINDER, JUGENDLICHE  
UND STUDIERENDE

---

AUSZEICHNUNGEN UND RUF

---

PUBLIKATIONEN

---

Preprints  
Mitherausgabe von Publikationen  
Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden  
Dissertationen  
Examensarbeiten

---

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN

---

Vorträge und Gastaufenthalte  
Vorlesungen und Seminare  
Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

---

TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

---

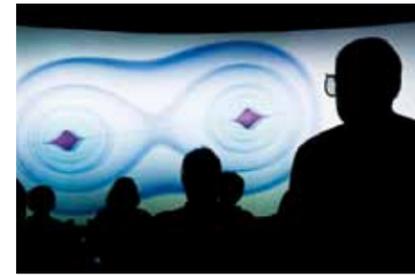
Gastvorträge  
Gastaufenthalte  
Tagungen und Veranstaltungen

---

SOFTWARE

---

## MEHR ALS „NUR“ WISSENSCHAFT UND FORSCHUNG – VERANSTALTUNGEN DES ZIB FÜR KINDER, JUGENDLICHE UND STUDIERENDE



Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des ZIB liegt seit vielen Jahren am Herzen, mehr qualifizierte junge Menschen für Mathematik und Informatik zu gewinnen. Großen Zulauf erhält das ZIB nicht nur in der „Langen Nacht der Wissenschaften“ und am „Girls' Day“, sondern auch bei vielen Besuchen und Führungen für Schüler und Studierende. Darüber hinaus unterstützt das ZIB Schulen mit für Wissenschaftszwecke nicht mehr benötigter Hardware und betreibt die informationstechnische Infrastruktur für den zentralen Server der Berliner Schulen.

Wir gehen selbst an Schulen und werden gerne von Schulen und Universitätskursen besucht. Im Jahr 2009 fanden 13 Veranstaltungen mit 290 Schülerinnen und Schülern am ZIB statt, 14 mal gingen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in Berliner und Brandenburger Schulen, um von ihrer Arbeit zu erzählen. ZIB-Mitarbei-

ter boten gut besuchte Kurse im Rahmen der FU-Sommeruni an und kooperierten mit der FU bei der Vorbereitung der FU-Kinderuni. An dieser Aktivität nahmen 2337 Schülerinnen und Schüler teil.

Zum bundesweiten „Girls' Day“ 2009 erhielten Mädchen der 5.–10. Klasse Einblicke in die am ZIB vertretenen Berufsfelder. In den angebotenen Workshops „Rechnerbasteln“, „Wissenschaftskino“, „Mathe gegen Krebs“ und „Suchrezepte für Computer“ präsentierten vor allem Mitarbeiterinnen des Instituts technische Details und algorithmische Probleme im Umgang mit Computern sowie Inhalte aktueller Arbeiten. Die 120 teilnehmenden Mädchen konnten das erlernte Wissen in praktischen Übungen ausprobieren.

Ein besonderer Höhepunkt war die internationale Sommerschule für Studenten und Post-Docs „Combinatori-

al Optimization at Work II“, kurz co@work, die vom 21. September bis 9. Oktober 2009 in Kooperation mit MATHEON am ZIB stattfand.

Die Veranstaltungen des ZIB im Rahmen der „Langen Nacht der Wissenschaften“ waren mit 1971 Besuchern wie schon seit Jahren gut nachgefragt. Neben vielen Vorträgen zu Themen wie z.B. „Literaturverwaltung auf dem Desktop“ oder „Vom Regenbogen zur Nano-Optik“ waren die Führungen im Rechnerraum zum Hochleistungsrechner, Erläuterungen zur langfristigen Datenhaltung sowie das 3-D-Wissenschaftskino im ZIB eigenen „Studio Da Vinci“ besondere Highlights. Wie jedes Jahr hielt Horst Zuse, der älteste Sohn Konrad Zuses, Vorträge zur Geschichte des Computers und zur Arbeit seines Vaters, die auf großes Interesse stießen.

## AUSZEICHNUNGEN UND RUF

### Tobias Achterberg

- Beale-Orchard-Hays-Preis der Mathematical Programming Society 2009
- Tucker Prize der Mathematical Programming Society 2009 (2. Preis)
- EURO Dissertation Award 2009

### Andreas Bley

- Ruf auf MATHEON-Nachwuchsgruppenleiterstelle (angenommen)

### Peter Deuffhard

- Internationaler Wissenschaftspreis des ICIAM „für originäre, tiefgreifende und unvergleichliche Verdienste in der angewandten Mathematik“

### Martin Grötschel

- Fellow of the Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM)

### Stefan Heinz

- 1. Preis der AIMMS-CPLEX/MOPTA Optimization Modeling Competition 2009

### Olga Heismann

- 3. Preis der International Mathematics Competition for University Students

### Ingrid Hotz

- Best Paper Award, TopInVis 2009 – Topological Methods in Data Analysis and Visualization, für den Beitrag „Combinatorial 2D Vector Field Topology Extraction and Simplification“

### Dagmar Kainmüller

- First prize in the MICCAI 2009 contest „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, category: automatic mandible segmentation

### Hans Lamecker

- First prize in the MICCAI 2009 contest „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, category: automatic mandible segmentation

### Jan Pomplun

- Best Poster Award der iNOW 2009, Stockholm, Berlin, 2.–15.08.2009

### Jan Reininghaus

- Best Paper Award, TopInVis 2009 – Topological Methods in Data Analysis and Visualization, für den Beitrag „Combinatorial 2D Vector Field Topology Extraction and Simplification“

### Markus Reuther

- GOR-Diplomarbeitspreis 2009

### Achim Schädle

- Ruf auf eine W2-Professur der Universität Düsseldorf (angenommen)

### Thomas Schlechte

- 1. Preis der AIMMS-CPLEX/MOPTA Optimization Modeling Competition 2009

### Jonas Schweiger

- 1. Preis der AIMMS-CPLEX/MOPTA Optimization Modeling Competition 2009

### Heiko Seim

- First prize in the MICCAI 2009 contest „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, category: automatic mandible segmentation

### Britta Weber

- Best Poster Award 2nd Prize, GK-Summerschool 2009 – Explorative Analysis and Visualization of Large Information Spaces, für das Poster „Segmentation of Microtubules from Electron Tomograms“

### Stefan Zachow

- First prize in the MICCAI 2009 contest „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, category: automatic mandible segmentation

## PUBLIKATIONEN

### PREPRINTS

Ein Verzeichnis aller Titel mit Abstracts ist im Anhang zu finden. Die Preprints sind abrufbar über:

[www.zib.de/bib/pub/index.de.html](http://www.zib.de/bib/pub/index.de.html)

### MITHERAUSGABE VON PUBLIKATIONEN

#### Artur Andrzejak

- Multiagent and Grid Systems – An International Journal, IOS Press, Amsterdam, Niederlande

#### Andreas Bley

- Technical Editor, Mathematical Programming Computation, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

#### Ralf Borndörfer

- Area Coordinator, Optimization Online, Mathematical Programming Society

#### Peter Deuffhard

- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science, Niederlande
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications (NM-TMA), Global Science Press, Peking, China
- International Journal of Computer Mathematics, Taylor & Francis, Vereinigtes Königreich

#### Armin Fügenschuh

- Technical Editor, Mathematical Programming Computation, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

### Martin Grötschel

- Mathematical Methods of Operations Research, Physica-Verlag, An Imprint of Springer-Verlag GmbH, Heidelberg
- Mathematical Programming A, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Networks, John Wiley & Sons, New York, USA
- Operations Research Letters, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Niederlande
- OR Transactions, Shanghai Scientific & Technological Publishing House, Shanghai, VR China
- Acta Mathematica Vietnamica, published under the auspices of the Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam
- Advances in Data Analysis and Classification (Theory, Methods, and Applications in Data Science) Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Mathematical Programming Computation, A journal of the Mathematical Programming Society, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York

### Hans-Christian Hege

- Visualization and Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- VideoMATH, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Computer Graphics Forum, Special Issue: EuroVis09 – Eurographics/IEEE Symposium on Visualization 2009

### Benjamin Hiller

- Technical Editor, Mathematical Programming Computation, Springer-Verlag, Berlin

### Ingrid Hotz

- Computer Graphics Forum, Special Issue: EuroVis09 – Eurographics/IEEE Symposium on Visualization 2009

### Thorsten Koch

- General Editor, Mathematical Programming Computation, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

### Alexander Reinefeld

- Future Generation Computer Systems (FGCS), Elsevier Science, Niederlande
- Journal of Grid Computing (JoGC), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- International Journal of Grid and Utility Computing (IJGUC), Inderscience Publishers, Olney, Vereinigtes Königreich
- International Journal of Computational Sciences (IJCS)
- W. Gentzsch, A. Reinefeld (eds.), Special Section on D-Grid, Future Generation Computer Systems 25 (2009) 266-267, (DOI: 10.1016/j.future.2008.09.008)

## BEITRÄGE IN ZEITSCHRIFTEN UND TAGUNGSBÄNDEN

1. T. Achterberg, **SCIP: Solving constraint integer programs**, Mathematical Programming Computation 1 (2009), Nr. 1, 1–41.

2. T. Achterberg und T. Berthold, Hybrid branching, **Integration of AI and OR Techniques in Constraint Programming for Combinatorial Optimization Problems**, 6th International Conference (CPAIOR 2009) (W. J. van Hoeve und J. N. Hooker, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 5547, Springer-Verlag, 2009, S. 309–311.

3. A. Andrzejak, **Generic self-healing via rejuvenation: Challenges, status quo, and solutions**, SASO Workshop on Architectures and Languages for Self-Managing Distributed Systems, 2009.

4. A. Andrzejak, D. Zeinalipour-Yazti und M. D. Dikaiakos, **Improving the dependability of computational grids via short-term failure predictions**, CoreGRID Workshop at Euro-Par 2009, 2009.

5. C. Auer, J. Sreevalsan-Nair, V. Zobel und I. Hotz, **2D tensor field segmentation**, 2009, submitted to Dagstuhl ‘Scientific Visualization 2009’.

6. A. Baharev, T. Achterberg und E. Rév, **Computation of an extractive distillation column with affine arithmetic**, AIChE Journal 55 (2009), 1695–1704, DOI: 10.1002/aic.11777.

7. E. Balas und R. Stephan, **On the cycle polytope of a directed graph and its relaxations**, Networks 54 (2009), Nr. 1, 47–55.

8. I. Barth, H.-C. Hege, H. Ikeda, A. Kenfack, M. Koppitz, J. Manz, F. Marquardt und G. K. Paramonov, **Concerted quantum effects of electronic and nuclear fluxes in molecules**, 2009, S. 118–123.

9. R. A. Bauer, K. Rother, P. Moor, K. Reinert, T. Steinke, J. M. Bujnicki und R. Preissner, **Fast structural alignment of biomolecules using a hash table, n-grams and string descriptors**, Algorithms 2 (2009), Nr. 2, 692–709.

10. T. Berthold, S. Heinz und M. E. Pfetsch, **Nonlinear pseudo-boolean optimization: relaxation or propagation?**, Theory and Applications of Satisfiability Testing – SAT 2009 (O. Kullmann, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 5584, Springer-Verlag, 2009, S. 441–446.

11. T. Berthold und M. E. Pfetsch, **Detecting orbital symmetries**, Operations Research Pro-

ceedings 2008 (B. Fleischmann, K. H. Borgwardt, R. Klein und A. Tuma, Hg.), Springer-Verlag, 2009, S. 433–438.

12. J. Bethge, G. Steinmeyer, S. Burger, F. Lederer und R. Iliew, **Guiding properties of chirped photonic crystal fibers**, Journal of Lightwave Technology 27 (2009), 1698.

13. G. Birkenheuer, A. Carlson, A. Fölling, M. Höggqvist, A. Hoheisel, A. Paspasyrou, K. Rieger, B. Schott und W. Ziegler, **Connecting communities on the meta-scheduling level: The DGSII approach**, Krakau Grid Workshop, 2009.

14. A. Bley, **Approximability of unsplittable shortest path routing problems**, Networks 54 (2009), Nr. 1, 23–46.

15. A. Bley, **On the hardness of finding small shortest path routing conflicts**, Proceedings of the 4th International Network Optimization Conference (INOC 2009), Pisa, Italy, 2009.

16. A. Bley, A. Gleixner, T. Koch und S. Vigerske, **Comparing MIQCP solvers on open pit mine production scheduling problems with stockpiling constraints**, Techn. Ber. 09-32, ZIB, 2009, Short version submitted to Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes: Proceedings of the 4th International Conference on High Performance Scientific Computing (HPSC 2009), Hanoi, Vietnam.

17. H. Boche und A. Eisenblätter, **Mathematik in der drahtlosen Kommunikation**, Produktionsfaktor Mathematik (M. Grötschel, K. Lucas und V. Mehrmann, Hg.), acatech diskutiert, Springer-Verlag, 2009, S. 197–222.

18. M. Bohge, A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und U. Türke, **An interference coupling model for adaptive soft frequency reuse in OFDMA/LTE networks**, Techn. Ber. TD(09) 757, COST 2100, Braunschweig, Germany, 2009.

19. N. Boland, I. Dumitrescu, G. Froyland und A. M. Gleixner, **LP-based disaggregation approaches to solving the open pit mining production scheduling problem with block processing selectivity**, Computers & Operations Research 36 (2009), 1064–1089, doi:10.1016/j.cor.2007.12.006.

20. R. Borndörfer und C. Cardonha, **A set partitioning approach to shunting**, LAGOS 09 V Latin-American Algorithms, Graphs and Optimization Symposium, Bd. 35, Electronic Notes in Discrete Mathematics, Nr. 1, Elsevier, 2009, S. 359–364.

21. R. Borndörfer, B. Erol und T. Schlechte, **Optimization of macroscopic train schedules via TS-OPT**, Proceedings of the 3rd International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis – Engineering and Optimisation Approaches (I. Hansen, E. Wendler, U. Weidmann, M. Lüthi, J. Rodriguez, S. Ricci und L. Kroon, Hg.), 2009.

22. R. Borndörfer, A. Mura und T. Schlechte, **Vickrey auctions for railway tracks**, Operations Research Proceedings 2008 (B. Fleischmann, K. H. Borgwardt, R. Klein und A. Tuma, Hg.), Springer-Verlag, 2009, ZIB Report 08-34, S. 551–556.

23. R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, **The line connectivity problem**, Operations Research Proceedings 2008 (B. Fleischmann, K. H. Borgwardt, R. Klein und A. Tuma, Hg.), Springer-Verlag, 2009, ZIB Report 08-31, S. 557–562.

24. R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, **Line planning and connectivity**, Models and Algorithms for Optimization in Logistics; Dagstuhl Seminar Proceedings (C. Barnhart, U. Clausen, U. Lauther und R. H. Möhring, Hg.), Schloß Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik, Germany, 2009.

25. M. Brandt und A. Brandt, **On sojourn times in M/GI systems under statedependent processor sharing**, Queueing Systems 64 (2010), 167–201.

26. A. Bujotzek und M. Weber, **Efficient simulation of ligand-receptor binding processes using the conformation dynamics approach**, Journal of Bioinformatics and Computational Biology 7 (2009), Nr. 5, 811–831.

27. S. Burger, **Simulation method improves accuracy for optical metrology and nanooptics design**, SPIE Newsroom (2009).

28. S. Burger, B. H. Kleemann, L. Zschiedrich und F. Schmidt, **3d finite-element simulations of light propagation through circular subwavelength apertures**, Microtechnologies for the New Millennium, Bd. 7366, Proc. SPIE, 2009, S. 736621.

29. S. Burger, D. Lockau, L. Zschiedrich und F. Schmidt, **Finite-element simulations of light propagation through subwavelength apertures in metal films**, International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modelling, Bd. XVIII, Fraunhofer Institute for Applied Optics and Precision Engineering, 2009, S. 59.

30. S. Burger und L. Zschiedrich, **Numerical investigation of silicon-on-insulator 1d photonic crystal microcavities**, Theoretical and computational

nanooptics: Proceedings of the 2nd International Workshop (D. N. Chigrin, Hg.), Bd. 1176, AIP, 2009, S. 43–45.

31. S. Burger, L. Zschiedrich, J. Pomplun, F. Schmidt, B. Kettner und D. Lockau, **3d finite-element simulations of enhanced light transmission through arrays of holes in metal films**, Numerical Methods in Optical Metrology, Bd. 7390, Proc. SPIE, 2009, S. 73900H.

32. A. Casanovas, J. Alonso, J. Torres und A. Andrzejak, **Work in progress: Building a distributed generic stress tool for server performance and behavior analysis**, Fifth IEEE International Conference on Autonomic and Autonomous Systems, 2009, S. 342–345.

33. M. Decker, S. Burger, S. Linden und M. Wegener, **Magnetization waves in split-ring-resonator arrays: Evidence for retardation effects**, Phys. Rev. B 80 (2009), Nr. 19, 193102.

34. V. J. Dercksen, M. Gensel und A. Kuß, **Visual accentuation of spatial relationships between filamentous and voluminous surface structures**, Conference Abstract: Eurographics/IEEE Symposium on Visualization, 2009.

35. V. J. Dercksen, B. Weber, D. Günther, M. Oberlaender, S. Prohaska und H.-C. Hege, **Automatic alignment of stacks of filament data**, Proc. IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro (2009), 971–974.

36. P. Deuffhard, O. Dössel, A. Louis und S. Zachow, **Mehr Mathematik wagen in der Medizin**, Produktionsfaktor Mathematik. Wie Mathematik Technik und Wirtschaft bewegt, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009, S. 435–459.

37. P. Deuffhard, B. Erdmann, R. Roitzsch und G. Lines, **Adaptive finite element simulation of ventricular dynamics**, J. Computing and Visualization in Science 12 (2009), 201–205.

38. P. Deuffhard und A. Schiela, **Katz und Maus**, Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) (2009), Nr. 1, 59.

39. F. Dickmann, M. Kaspar, B. Löhnhardt, N. Kepper, F. Viezens, F. Hertel, M. Lesnussa, Y. Mohammed, A. Thiel, T. Steinke, J. Bernarding, D. Krefting, T. A. Knoch und U. Sax, **Visualization in health grid environments: A novel service and business approach**, grid economics and business models, 6th International Workshop, GECON 2009, LNCS, Bd. 5745, Springer-Verlag, 2009, S. 150–159.

40. A. Dittel, A. Fügenschuh, S. Göttlich und M. Herty, **MIP presolve techniques for a PDE-based supply chain model**, Optimization Methods and Software 24 (2009), Nr. 3, 427–445.

41. J. Dworzak, H. Lamecker, S. Zachow, J. von Berg, T. Klinder, C. Lorenz, D. Kainmüller, H. Seim und H.-C. Hege, **3D reconstruction of the human rib cage from 2D projection images using a statistical shape model**, Int. Journ. of Computer Assisted Radiology and Surgery (2009), 111–124.

42. H. Franck, S. Lohrum, T. Klein, M. Kuberek und G. Maiwald, **Automatisierte Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken**, ZIB Report 09-26, ZIB, 2009.

43. H. Franck, S. Lohrum, T. Klein, M. Kuberek und G. Maiwald, **Automatisierte Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken**, ZIB Report 09-26, ZIB, 2009.

44. H. Franck, S. Lohrum, T. Klein, M. Kuberek und G. Maiwald, **Automatisierte Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken**, ZIB Report 09-26, ZIB, 2009.

45. H. Franck, S. Lohrum, T. Klein, M. Kuberek und G. Maiwald, **Automatisierte Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken**, ZIB Report 09-26, ZIB, 2009.

46. A. Fügenschuh, **Solving a School Bus Scheduling Problem with Integer Programming**, European Journal of Operational Research 193 (2009), Nr. 3, 867–884.

47. A. Fügenschuh, S. Göttlich, C. Kirchner, M. Herty und A. Martin, **Efficient Reformulation and Solution of a Nonlinear PDE-Controlled Flow Network Model**, Computing 85 (2009), Nr. 3, 245–265.

48. A. Fügenschuh, B. Geißler, A. Martin und A. Morsi, **The transport PDE and mixed-integer linear programming**, Models and Algorithms for Optimization in Logistics (C. Barnhart, U. Clausen, U. Lauther und R. H. Möhring, Hg.), Dagstuhl Seminar Proceedings, Nr. 09261, Schloß Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik, Germany, 2009.

49. A. Fügenschuh, H. Homfeld und H. Schuellerdorf, **Routing cars in rail freight service**, Models and Algorithms for Optimization in Logistics (C. Barnhart, U. Clausen, U. Lauther und R. H. Möhring, Hg.), Dagstuhl Seminar Proceedings, Nr. 09261, Schloß Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik, Germany, 2009.

50. J. K. Gansel, M. Wegener, S. Burger und S. Linden, **Gold helix photonic metamaterials: A numerical parameter study**, Opt. Express 18 (2010), 1059–1069.

51. J. Geibig, **Availability of data in locality-aware unreliable networks**, In Proceedings of the Second International Conference on Advances in Mesh Networks MESH2009, 2009.

52. L. Goubergrits, S. Weber, C. Petz, A. Spuler, J. Pöthke, A. Berthe und H.-C. Hege, **Wall-PIV as a near wall flow validation tool for CFD**, Journal of Visualization 12 (2009), Nr. 3, 241–250.

53. L. Goubergrits, E. Wellenhofer, U. Kertscher, K. Affeld, C. Petz und H.-C. Hege, **Coronary artery WSS profiling using a geometry reconstruction based on biplane angiography**, Annals of Biomedical Engineering 37 (2009), Nr. 4, 682–691.

54. M. Grötschel, B. Hiller und A. Tuchscherer, **Structuring a dynamic environment: combinatorial online optimisation of logistics processes**, Emergence, analysis, and evolution of structures. Concepts and strategies across disciplines (K. Lucas und P. Roosen, Hg.), Springer-Verlag, 2009, S. 199–214.

55. M. Grötschel und J. Lügger, **E-Learning and the working mathematician**, Grundfragen multimedialen Lehrens und Lernens – Bildungsimpulse und Bildungsnetzwerke (N. Apostolopoulos, U. Mußmann, K. Rebensburg und F. Wulschke, Hg.), TU Berlin, Universitätsverlag, 2009, S. 8–27 (German).

56. M. Grötschel und J. Lügger, **Veränderungen der Publikations- und Kommunikationswelt: Open Access, Google, etc., Gegenworte** (2009), Nr. 21, 69–72 (German).

57. M. Grötschel und B. Lutz-Westphal, **Diskrete Mathematik und ihre Anwendungen: Auf dem Weg zu authentischem Mathematikunterricht**, Jahresbericht der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (Hans-Christoph Grunau u. a., Hg.), Bd. 111, Vieweg+Teubner, 2009, S. 3–22 (German).

58. R. Haller-Dintelmann, J. Rehberg, C. Meyer und A. Schiela, **Hölder continuity and optimal control for nonsmooth elliptic problems**, Appl. Math. and Optimization 60 (2009), Nr. 3, 397–428.

59. T. Harks, S. Heinz und M. E. Pfetsch, **Competitive online multicommodity routing**, Theory of Computing Systems 45 (2009), Nr. 3, 533–554, DOI 10.1007/s00224-009-9187-5.

60. T. Heimann, B. van Ginneken, M. Styner, Y. Arzhaeva, V. Aurich, C. Bauer, A. Beck, C. Becker, R. Beichel, G. Bekes, F. Bello, G. Binnig, H. Bischof, A. Bornik, P. Cashman, Y. Chi, A. Cordova, B. Dawant, M. Fidirich, J. Furst, D. Furukawa, L. Grenacher, J. Hornegger, D. Kainmüller, R. Kitney, H. Kobatake, H. Lamecker, T. Lange, J. Lee, B. Lennon, R. Li, S. Li, H. Meinzer, G. Nemeth, D. Raicu, A. Rau, E. van Rikxoort, M. Rousson, L. Rusko, K. Saddi, G. Schmidt, D. Seghers, A. Shimizu, P. Slagmolen, E. Sorantin, G. Soza, R. Susomboon, J. Waite, A. Wimmer und I. Wolf, **Comparison and evaluation of methods for liver segmentation from CT datasets**, IEEE Transactions on Medical Imaging 28(8) (2009), 1251–1265.
61. T. Heimann, F. Chung, H. Lamecker und H. Delingette, **Subject-specific ligament models: Towards real-time simulation of the knee joint**, Proc. Computational Biomechanics for Medicine IV Workshop, 2009, accepted for publication.
62. S. Heinz und M. Sachenbacher, **Using model counting to find optimal distinguishing tests**, Integration of AI and OR Techniques in Constraint Programming for Combinatorial Optimization Problems (W.-J. van Hoeve und J. N. Hooker, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 5547, Springer-Verlag, 2009, S. 117–131.
63. F. Hertel, D. Krefting, R. Lützkendorf, F. Viezens, A. Thiel, K. Peter und J. Bernarding, **Diffusion Tensor Imaging als Grid-Anwendung: Performanzsteigerung und standortunabhängiger Zugang zu leistungsfähigen Ressourcen**, GI-Edition Lecture Notes in Informatics (LNI), Bd. P-154, Bonner Köllen Verlag, 2009, S. 116.
64. B. Hiller, T. Klug und A. Tuchscherer, **Improving the performance of elevator systems using exact reoptimization algorithms**, Models and Algorithms for Optimization in Logistics (C. Barnhart, U. Clausen, U. Lauther und R. H. Möhring, Hg.), Dagstuhl Seminar Proceedings, Nr. 09261, Schloß Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik, Germany, 2009.
65. B. Hiller, T. Klug und A. Tuchscherer, **Improving the performance of elevator systems using exact reoptimization algorithms**, 9th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems (MAPSP 2009) (C. Stein, M. Uetz und T. Vredeveld, Hg.), 2009.
66. B. Hiller und T. Vredeveld, **Stochastic dominance analysis of online bin coloring algorithms**, 9th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems (MAPSP 2009) (C. Stein, M. Uetz und T. Vredeveld, Hg.), 2009, <http://ctit.utwente.nl/library/proceedings/wp0911.pdf>
67. M. Hinze und A. Schiela, **Discretization of interior point methods for state constrained elliptic optimal control problems: Optimal error estimates and parameter adjustment.**, Comp. Opt. and Appl. (2009), published online.
68. J. Hoffmann, C. Hafner, P. Leidenberger, J. Hesselbarth und S. Burger, **Comparison of electromagnetic field solvers for the 3d analysis of plasmonic nano antennas**, Numerical Methods in Optical Metrology, Bd. 7390, Proc. SPIE, 2009, S. 73900J.
69. M. Höggqvist, **Architecture and self-tuning of a DISC-system (poster)**, TCPP PhD forum at IPDPS 2009, 2009.
70. M. Höggqvist und N. Kruber, **Active/passive load balancing with informed node placement in DHTs**, IWSOS, 2009.
71. M. Höggqvist und S. Plantikow, **Towards explicit data placement in scalable key/value stores**, SASO Workshop on Architectures and Languages for Self-Managing Distributed Systems, 2009.
72. F. Hupfeld, B. Kolbeck, J. Stender, M. Höggqvist, T. Cortes, J. Marti und J. Malo, **FaTLease, scalable fault-tolerant lease negotiation with paxos**, Journal of Cluster Computing 12 (2009), Nr. 2, 175–188.
73. D. Kainmüller, H. Lamecker, H. Seim und S. Zachow, **Multi-object segmentation of head bones**, MIDAS Journal – Head and neck auto-segmentation challenge (2009), <http://hdl.handle.net/10380/3099>.
74. D. Kainmüller, H. Lamecker, H. Seim, M. Zinser und S. Zachow, **Automatic extraction of mandibular nerve and bone from cone-beam CT data**, Proceedings of Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention (MICCAI) (G.-Z. Yang, D. J. Hawkes, D. Rueckert, J. A. Noble und C. J. Taylor, Hg.), 2009, S. 76–83.
75. D. Kainmüller, H. Lamecker und S. Zachow, **Multi-object segmentation with coupled deformable models**, Annals of the British Machine Vision Association (BMVA) 5 (2009), 1–10.
76. D. Kainmüller, H. Lamecker, S. Zachow und H.-C. Hege, **An articulated statistical shape model for accurate hip joint segmentation**, EBMC 2009. Int. Conf. of the IEEE Eng. in Med. and Biol. Society (EMBC), 2009, S. 6345–6351.

77. M. Karl, B. Kettner, S. Burger, F. Schmidt, H. Kalt und M. Hetterich, **Dependencies of micropillar cavity quality factors calculated with finite element methods**, Optics Express 17 (2009), 1144.
78. J. Kasten, I. Hotz, B. Noack und H.-C. Hege, **On the extraction of longliving features in unsteady fluid flows**, 2009, accepted for publication at TopInVis 2009.
79. J. Kasten, C. Petz, I. Hotz, B. R. Noack und H.-C. Hege, **Localized finitetime Lyapunov exponent for unsteady flow analysis**, Vision Modeling and Visualization (M. Magnor, B. Rosenhahn und H. Theisel, Hg.), Bd. 1, Universität Magdeburg, Inst. f. Simulation u. Graph., 2009, S. 265–274.
80. C. Klapproth, P. Deuffhard und A. Schiela, **A perturbation result for dynamical contact problems**, Numer. Math. Theor. Meth. Appl. 2 (2009), Nr. 3, 237–257.
81. B. Kolbeck, **A protocol for efficient and fault-tolerant file replication over wide-area networks**, TCPP PhD forum at IPDPS 2009, 2009.
82. E. Kornaropoulos, W. Taylor, G. Duda, R. Ehrig und M. Heller, **Frontal plane lower limb alignment using functionally determined joint centers and axes**, International Conference on Computational Bioengineering, 2009.
83. E. Kornaropoulos, W. Taylor, G. Duda, R. Ehrig und M. Heller, **An imageless method to quantify the mechanical femoral-tibial angle (mfta) using functionally defined joint centers and axes**, Annual meeting of the German Society for Biomechanics, 2009.
84. E. Kornaropoulos, W. Taylor, G. Duda, R. Ehrig, G. Matziolis, M. Müller, G. Wassilew, P. Asbach, C. Perka und M. Heller, **An imageless method to quantify the mechanical femoral-tibial angle based on the functional determination of joint centers and axes**, Annual meeting of the ESMAC, 2009.
85. A. Koster, S. Orłowski, C. Raack, G. Baier, T. Engel und P. Belotti, **Branch-and-cut techniques for solving realistic two-layer network design problems**, Kap. 3, S. 95–118, Springer-Verlag, 2009.
86. A. Koster und C. Raack, **A packing integer program arising in two-layer network design**, Proceedings of the INOC 2009, Pisa, Italy, International Network Optimization Conference, 2009.

87. S. Kratzstein, M. Heller, R. Ehrig, G. Duda, J. Schröder und W. Taylor, **Die Bestimmung der Genauigkeit nicht-invasiver Techniken zur Ermittlung der Hüftgelenksposition in-vivo**, 6th annual meeting of the German Society for Biomechanics (DGfB), 2009.
88. S. Kratzstein, W. Taylor, R. Ehrig und M. Heller, **Reduction of the influence of skin marker artefacts using the optimal common shape technique**, Annual meeting of the ESMAC, 2009.
89. M. Kuberek, **Strategien für die Zukunft der regionalen Informationsinfrastruktur – Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)**, Regionale Kooperationen im Kulturbereich. Theoretische Grundlagen und Praxisbeispiele, Bielefeld, 2009, S. 251–259.
90. A. Kuß und H.-C. Hege, **Knowledge representation for digital atlases**, Conference Abstract: Workshop of the Working Group Ontologies in Biomedicine and the Life Science, 2009.
91. A. Kuß, S. Prohaska und J. Rybak, **Using ontologies for the visualization of hierarchical neuroanatomical structures**, Frontiers in Neuroinformatics. Conference Abstract: 2nd INCF Congress of Neuroinformatics, 2009.
92. H. Lamecker, T. Mansi, J. Relan, F. Billet, M. Sermesant, N. Ayache und H. Delingette, **Adaptive tetrahedral meshing for personalized cardiac simulations**, Proc. MICCAI Workshop on Cardiovascular Interventional Imaging and Biophysical Modelling (CI2BM), 2009, S. 149–158.
93. D. Lockau, L. Zschiedrich und S. Burger, **Accurate simulation of light transmission through subwavelength apertures in metal films**, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 11 (2009), 114013.
94. D. Lockau, L. Zschiedrich, F. Schmidt, S. Burger und B. Rech, **Efficient simulation of plasmonic structures for solar cells**, International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modelling, Bd. XVIII, Fraunhofer Institute for Applied Optics and Precision Engineering, 2009, S. 48.
95. S. Lohrum, H. Franck, T. Klein, M. Kuberek und G. Maiwald, **Automatisierte Fernleihe im KOBV-Handbuch für Bibliotheken**, ZIB Report 09-26, ZIB, 2009.
96. R. Lützkendorf, F. Viezens, F. Hertel, D. Krefting, K. Peter und J. Bernarding, **Performanzsteigerung von Diffusion Tensor Image Analyse durch Nutzung Grid-basierter Workflows**, GMDS, 2009.

97. J. Lügger, **Veränderungen der Publikations- und Kommunikationswelt: Open Access, Google etc.**, Gegenworte 21 (2009).
98. J. Lügger, **Zum Nutzen des Web 2.0 für „Die kleine Kollaboration“**, ABITechnik 29 1 (2009), 1–11.
99. J. Lügger und M. Grötschel, **E-learning and the working mathematician**, GML2 2009 – Grundfragen Multimedialen Lehrens und Lernens, 2009, S. 8–27.
100. G. Maiwald und W. Peters-Kottig, **Ergebnisse aus dem BVB-KOBV-Entwicklungsprojekt „Literaturverwaltung“ – Handreichung für Bibliotheken**, Techn. ber., ZIB, 2009.
101. M. Martens, **A simple greedy algorithm for the k-disjoint flow problem**, Proceedings of the 6th Annual Conference on Theory and Applications of Models of Computation, 2009, S. 291–300.
102. M. Martens, A. Richter, E. Patzak und R. Wessälly, **Methoden zur Planung und Optimierung von FTx-Netzen**, Tagungsband der 16. ITG-Fachtagung „Kommunikationskabelnetze“, 2009, S. 37–41.
103. M. Martens und M. Skutella, **Flows with unit path capacities and related packing and covering problems**, Journal of Combinatorial Optimization 18 (2009), Nr. 3, 272–293.
104. M. Moser, S. Haridi, T. Shaafat, T. Schütt, M. Höggqvist und A. Reinefeld, **Transactional DHT algorithms**, Techn. Ber. ZR-09-34, Zuse-Institut Berlin, 2009.
105. W. Neun, **REDUCE – freie Software seit 2009**, Rundbrief der Fachgruppe Computeralgebra der DMV/GAMM/GI 44 (2009).
106. W. Neun, **Reduce is free software**, ACM Communications in Computer Algebra 43 (2009), Nr. 1.
107. Y. Neve-Oz, T. Pollok, S. Burger, M. Golosovsky und D. Davidov, **Fast light and focusing in 2d photonic quasicrystals**, PIRS Online 5 (2009), 451.
108. M. Oberlaender, R. M. Bruno, C. P. de Kock, H.-S. Meyer, V. J. Dercksen und B. Sakmann, **3D distribution and sub-cellular organization of thalamocortical VPM synapses for individual excitatory neuronal cell types in rat barrel cortex**, Neuroscience 2009, the 39th annual meeting of the Society for Neuroscience (SfN). Conference abstract, 2009.

109. M. Oberlaender, V. J. Dercksen, R. Egger, M. Gensel, B. Sakmann und H.-C. Hege, **Automated three-dimensional detection and counting of neuron somata**, Journal of Neuroscience Methods 180 (2009), Nr. 1, 147–160.
110. M. Oberlaender, V. J. Dercksen, S. Lang und B. Sakmann, **3D mapping of synaptic connections within “in silico” microcircuits of full compartmental neurons in extended networks on the example of VPM axons projecting into S1 of rats.**, Frontiers in Neuroinformatics. Conference Abstract: 2nd INCF Congress of Neuroinformatics, 2009.
111. S. Orłowski und M. Pióro, **On the complexity of column generation in survivable network design with path-based survivability concepts**, Proceedings of the 4th International Network Optimization Conference (INOC 2009), Pisa, Italy, 2009.
112. S. Orłowski, M. Pióro, A. Tomaszewski und R. Wessälly, **SNDlib 1.0 – Survivable Network Design Library, Networks (2009)**, erscheint, online veröffentlicht am 19.10.2009.
113. K. Peter, **Distributed erasure tolerant storage with solid state technology**, TCPP PhD forum at IPDPS 2009, 2009.
114. C. Petz, J. Kasten, S. Prohaska und H.-C. Hege, **Hierarchical vortex regions in swirling flow**, Computer Graphics Forum 28 (2009), Nr. 3, 863–870.
115. S. Plantikow, K. Peter, M. Höggqvist, C. Grimme und A. Pappaspyrou, **Generalizing the data management of three community grids**, Future Generation Computer Systems (FGCS) 25 (2009), Nr. 3, 281–289.
116. J. Pomplun und F. Schmidt, **Reduced basis method for fast and robust simulation of electromagnetic scattering problems**, Numerical Methods in Optical Metrology, Bd. 7390, Proc. SPIE, 2009.
117. J. Pomplun, L. Zschiedrich, S. Burger und F. Schmidt, **Reduced basis method for computational lithography**, Photomask Technology, Bd. 7488, Proc. SPIE, 2009, S. 74882B. 16 Publikationen
118. U. Prüfert und A. Schiela, **The minimization of an L1-functional subject to an elliptic PDE and state constraints**, ZAMM 89 (2009), Nr. 7, 536–551, Preprint: <http://opus.kobv.de/zib/volltexte/2008/1100/>.

119. A. Reinefeld, **Heuristic search**, In, C. A. Floudas, P. M. Pardalos (eds.), Encyclopedia of Optimization, 2nd Edition, ISBN 978-0-387-74759-0 (2009), 1506–1508.

120. A. Reinefeld, **Parallel heuristic search**, In, C. A. Floudas, P. M. Pardalos (eds.), Encyclopedia of Optimization, 2nd Edition, ISBN 978-0-387-74759-0 (2009), 2908–2912.

121. A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt und S. Haridi, **A scalable, transactional data store for future internet services**, In, G. Tselentis et al. (eds.) Towards the Future Internet - A European Research Perspective, ISBN 978-1-60750-007-0 (2009), 148–159.

122. A. Reinefeld und T. Schütt, **Out-of-core parallel heuristic search with Map-Reduce**, High-Performance Computing Symposium (HPCS) 2009, LNCS, Bd. 5976, Springer-Verlag, 2009, S. 323–336.

123. J. Reininghaus und I. Hotz, **Combinatorial 2D vector field topology extraction and simplification**, 2009, accepted for publication at TopolnVis 2009.

124. S. Röblitz und M. Weber, **Fuzzy spectral clustering by PCCA+**, Classification and Clustering: Models, Software and Applications, WIAS-Report (H. J. Mucha und G. Ritter, Hg.), Bd. 26, 2009, S. 73–79.

125. O. Rosanwo, C. Petz, S. Prohaska, I. Hotz und H.-C. Hege, **Dual streamline seeding**, Proceedings of the IEEE Pacific Visualization Symposium (P. Eades, T. Ertl und H.-W. Shen, Hg.), 2009, S. 9–16.

126. J. Rybak, A. Kuß, W. Holler, R. Brandt, H.-C. Hege und R. Menzel, **The honeybee standard brain (HSB) – a versatile atlas tool for integrating data and data exchange in the neuroscience community**, BMC Neuroscience, Bd. 10 (Suppl 1): P1, 2009.

127. S. Saliba, S. O. Krumke, B. Hiller und A. Tuchscherer, **Randomized online algorithms for the dynamic multi-period routing problem**, 9th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems (C. Stein, M. Uetz und T. Vredeveld, Hg.), 2009.

128. A. Schiela, **Barrier methods for optimal control problems with state constraints**, SIAM J. Optim. 20 (2009), Nr. 2, 1002–1031.

129. A. Schiela, **An extended mathematical framework for barrier methods in function space**, Lecture Notes in Computational Science and Engineering 70 (2009), 201–208.

130. A. Schiela, **State constrained optimal control problems with states of low regularity**, SIAJJC2

131. F. Schintke, A. Reinefeld, S. Haridi und T. Schütt, **Enhanced paxos commit for transactions on DHTs**, Techn. Ber. ZR-09-28, Zuse-Institut Berlin, 2009.

132. T. Schütt, A. Reinefeld, F. Schintke und C. Hennig, **Self-adaptation in largescale systems: A study on structured overlays across multiple data centers**, SASO Workshop on architectures and languages for self-managing distributed systems, 2009.

133. T. Schütt, A. Reinefeld, F. Schintke und M. Hoffmann, **Gossip-based topology inference for efficient overlay mapping on data centers**, 9th International conference on peer-to-peer computing, 2009.

134. H. Seim, D. Kainmüller, M. Heller, S. Zachow und H.-C. Hege, **Automatic extraction of anatomical landmarks from medical image data: An evaluation of different methods**, Proc. of IEEE Int. Symposium on Biomedical Imaging (ISBI): From Nano to Macro, 2009, S. 538–541.

135. H. Seim, D. Kainmüller, H. Lamecker und S. Zachow, **A system for unsupervised extraction of orthopaedic parameters from CT data**, GI Workshop Softwareassistenten – Computerunterstützung für die medizinische Diagnose und Therapieplanung, GI-Edition Lecture Notes in Informatics, 2009, S. 1328–1337.

136. O. Shehory, J. Martinez, A. Andrzejak, C. Cappelletto, W. Funika, D. Kondo, L. Mariani, B. Satzger und M. Schmid, **Self-healing and recovery methods and their classification**, Dagstuhl Seminar Proceedings 09201, ISSN 1862-4405, 2009.

137. J. Sreevalsan-Nair, C. Auer, B. Hamann und I. Hotz, **Eigenvector-based interpolation and segmentation of 2D tensor fields**, 2009, accepted for publication at TopolnVis.

138. J. Stender, **Efficient management of consistent backups in a distributed file system**, 33rd Annual IEEE International Computer Software and Applications Conference, 2009.

139. R. Stephan, **Facets of the (s, t)-p-path polytope**, Discrete Appl. Math. 157 (2009), Nr. 14, 3119–3132.

140. W. Taylor, E. Kornaropoulos, R. Ehrig, M. Heller und G. Duda, **Reproducibility of a functional approach to gait analysis**, Annual meeting of the ESMAC, 2009.

141. M. Weber, **Spurenstoffe im Trinkwasser – Risikoqualifizierung im Rechner?**, Schriftenreihe des Vereins für Wasser-, Boden- und Lufthygiene e.V. (CDROM) (L. Dunemann und O. Schmoll, Hg.), Bd. 134, 2009.

142. M. Weber, V. Durmaz, R. Becker und S. Esslinger, **Predictive identification of pentabromocyclododecane (PBCD) isomers with high binding affinity to hTTR**, Organohalogen Compounds 71 (2009), 247–252.

143. T. Weinkauff und D. Günther, **Separatrix persistence: Extraction of salient edges on surfaces using topological methods**, Computer Graphics Forum (Proc. SGP'09) 28 (2009), Nr. 5, 1519–1528.

144. M. Weiser, **Optimization and identification in regional hyperthermia**, Int. J. Appl. Electromagn. Mech. 30 (2009), 265–275.

145. M. Weiser, **Pointwise nonlinear scaling for reaction-diffusion equations**, Appl. Num. Math. 59 (2009), Nr. 8, 1858–1869.

146. S. Zachow, H. Lamecker, M. Zöckler und E. J. Haberl, **Computergestützte Planung zur chirurgischen Korrektur von frühkindlichen Schädeldefektbildungen (Craniosynostosen)**, Face 02/09, Int. Mag. of Orofacial Esthetics, Oemus Journale Leipzig (2009), 48–53.

147. S. Zachow, P. Muigg, T. Hildebrandt, H. Doleisch und H.-C. Hege, **Visual analysis of nasal airflow**, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 15 (2009), Nr. 8, 1407–1414.

148. L. Zschiedrich, **Transparent boundary conditions for maxwell's equations: Numerical concepts beyond the PML method**, Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin, 2009.

## DISSERTATIONEN

### Freie Universität Berlin

#### Lin Zschiedrich

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung) **Transparent Boundary Conditions for Maxwell's Equations: Numerical Concepts Beyond the PML Method**  
Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

### Humboldt-Universität zu Berlin

#### Felix Hupfeld

(Abt. Computer Science) **Causal Weak-Consistency Replication – A Systems Approach**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

#### Thorsten Schütt

(Abt. Computer Science) **Range Queries on Distributed Hash Tables**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

#### Florian Schintke

(Abt. Computer Science) **Management verteilter Daten in Grid- und Peer-to-Peer-Systemen**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

### Technische Universität Berlin

#### Benjamin Hiller

(Abt. Optimierung) **Online Optimization: Probabilistic Analysis and Algorithm Engineering**  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

#### Rüdiger Stephan

(Abt. Optimierung) **Polyhedral Aspects of Cardinality Constrained Combinatorial Optimization Problems**  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

#### Sebastian Orłowski

(Abt. Optimierung) **Optimal Design of Survivable Multi-layer Telecommunication Networks**  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

### Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

#### Jan Sahner

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse) **Extraction of Vortex Structures in 3D Flow Fields**  
Betreuer: Holger Theisel (Universität Magdeburg) und Hans-Christian Hege (ZIB)

## EXAMENSARBEITEN

### Freie Universität Berlin

#### Vedat Durmaz

(Abt. Numerik) **Theoretical Investigations on HBCD and PBCD: Interconversion Rates and Receptor Binding Processes**  
Betreuer: Marcus Weber, Paul Vrede (FU Berlin und ZIB)

#### Maria Gensel

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse) **Visualisierungsmethoden zur Verdeutlichung der räumlichen Beziehungen zwischen linien- und flächenartigen Strukturen am Beispiel neurobiologischer Daten**  
Betreuer: Helmut Alt (FU Berlin), Hans-Christian Hege (ZIB)

#### Fiete Haack

(Abt. Numerik) **Representative spectral clustering for large data sets applied to gene expression data**  
Betreuer: Marcus Weber, Robert Preißner (FU Berlin und ZIB)

#### Olufemi Rosanwo

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse) **Interactive Multi-Object Segmentation with Max-Tree Filtering**  
Betreuer: Helmut Alt (FU Berlin), Ingrid Hotz (ZIB), Steffen Prohaska (ZIB)

#### Olga Scharkoi

(Abt. Numerik) **Conformation Dynamics Design of Pain Relief Drugs**  
Betreuer: Marcus Weber, Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

#### Charlotte Winkler

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

### Graph-Cut Segmentation for 3D Single-Plane Illumination Microscopy Images of Cells

Betreuer: Dr. Jürgen Braun (Charité – Universitätsmedizin Berlin), Steffen Prohaska (ZIB)

### Humboldt-Universität zu Berlin

#### Aram Altschudjian

(Abt. Computer Science Research) **Improving Programming Efficiency via Rich Data Structures**  
Betreuer: Artur Andrzejak (HU Berlin und ZIB)

#### Matthias Beick

(Abt. Computer Science Research) **On-Line Processing of Streams and Time Series – An Evaluation**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

#### Sebastian Borchert

(Abt. Computer Science Research) **Portierung von Reed-Solomon- und Lennard-Jones-Codes auf ClearSpeed**  
Betreuer: Thomas Steinke (HU Berlin und ZIB)

#### Nina Engelhardt

(Abt. Computer Science Research) **Parallelization of a thermal modeling algorithm**  
Betreuer: Thomas Steinke (HU Berlin und ZIB)

#### Nico Kruber

(Abt. Computer Science Research) **DHT Load Balancing with Estimated Global Information**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

#### Daniel Mauter

(Abt. Computer Science Research) **Ein eingebettetes Hauptspeicher-Datenbanksystem mit Snapshot-Reads**  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB) Technische Universität Berlin

#### Sebastian Behrendt

(Abt. Optimierung) **Dienstreihenfolgeplanung mit ganzzahliger Optimierung**  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Biliana Boeva**

(Abt. Optimierung)

**Veranstaltungsplanung mit Multiple-Knapsack-Methoden**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Jalda Dworzak**

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

**3D Reconstruction of the Human Rib Cage from 2D Projection Images using a Statistical Shape Model**Betreuer: Olaf Hellwich (TU Berlin),  
Hans Lamecker (ZIB)**Cemil Erdogan**

(Abt. Optimierung)

**Computing Prices for Track Allocations**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Berkan Erol**

(Abt. Optimierung)

**Models for the Train Timetabling Problem**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Torsten Klug**

(Abt. Optimierung)

**Groups of Passenger Elevators with Destination Hall Call Registration: Online Control via Reoptimization Algorithms**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Kathrin Lindow**

(Abt. Optimierung)

**Heuristiken zur Dienststreichfolgeplanung**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Norbert Lindow**

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

**Dynamische Moleküloberflächen**Betreuer: Marc Alexa (TU Berlin),  
Hans-Christian Hege, Daniel Baum  
(ZIB)**Christian Lorenz**

(Abt. Computer Science Research)

**Leistungsverbesserung der Datenübertragung bei der Replikation von nicht veränderlichen Dateien in einem verteilten Dateisystem**Betreuer: Alexander Reinefeld  
(HU Berlin und ZIB)**Josefine Müller**

(Abt. Optimierung)

**Facets of the cutset polyhedron of 2-layer survivable network design problems**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Suganya Murugaiah**

(Abt. Optimierung)

**Polynomial lösbare Matching-Probleme**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Nils Paetsch**

(Abt. Optimierung)

**Multiobjective Duty Scheduling**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Christian Schumann**

(Abt. Optimierung)

**Multikriterielle Umlaufplanung im ÖPNV**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB)**Markus Reuther**

(Abt. Optimierung)

**Tourenplanung mit Längenbeschränkung**Betreuer: Martin Grötschel  
(TU Berlin und ZIB (anerkannt))**Technische Universität Darmstadt****Stephan Petsch**

(Abt. Optimierung)

**Verfahren zur Lösung des****Soft Rectangle Packing Problem**

Betreuer: Armin Fügenschuh (ZIB)

**VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN****VORTRÄGE UND GASTAUFENTHALTE****Tobias Achterberg**

07.07.2009

**Advances in MIP – new tricks for the bag**  
EURO 2009, Bonn

24.08.2009

**Recent improvements in CPLEX**  
ISMP 2009, Chicago, USA

27.08.2009

**Advances in MIP – new tricks for the bag**  
ISMP 2009, Chicago, USA

29.09.2009

**Advanced MIP solving with CPLEX**  
ZIB, Berlin**Artur Andrzejak**

31.03.2009

**Predictive methods for managing dependability and performance of systems (Tutorial)**

ACM European Conference on Computer Systems (EuroSys 2009), Nürnberg

07.05.2009

**Ensuring collective availability in volatile resource pools via classification**  
Seminar, Schloß Dagstuhl

12.05.2009

**The case for transparent software rejuvenation**

Seminar, Schloß Dagstuhl

29.06.2009

**Modeling and resolving software aging in web service applications**

Wissenschaftlicher Beirat des ZIB, Berlin

15.09.2009

**Generic self-healing via rejuvenation: challenges, status quo, and solutions**  
SELFMAN@SASO09, San Francisco, Kalifornien, USA

02.11.2009

**Measuring, modeling and resolving software aging in SOA applications**  
INRIA Grenoble, Frankreich**Cornelia Auer**

24.02.2009

**Eigenvector-based interpolation and segmentation of 2D tensor fields**  
TopoInVis 2009, Snowbird, Utah, USA**Nicolas-Pascal Becker**

03.06.2009

**OPUS 4: Ein- und Ausblick, Standvortrag**  
98. Deutscher Bibliothekarstag, Erfurt

03.07.2009

**Opus-Version 4**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

08.12.2009

**OPUS- und Archivierungsdienste der KOBV-Zentrale: Aufbau, Pflege und Betrieb lokaler Dokumentenserver**  
BVB-OPUS-Anwenderkonferenz, Nürnberg**Timo Berthold**

03.06.2009

**Solving constraint integer programs**

Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA

29.05.2009

**Hybrid branching**

CPAIOR2009, Pittsburgh, USA

08.06.2009

**Integrated modeling and solution software for CIPs**

Poster- and Software Presentation at the MIP Conference 2009, University of California, Berkeley, USA

27.08.2009

**Hybrid branching**

ISMP2009, Chicago, USA

26.09.2009

**Branching, presolving, and constraint handlers**

ZIB, Berlin

30.09.2009

**Cutting planes and primal heuristics**

ZIB, Berlin

19.11.2009

**Hybrid branching**

University of Melbourne, Australien

**Andreas Bley**

02.02.2009

**Optimierung realer Netze**

TU Berlin, Berlin

26.02.2009

**How to solve real-world****network problems!**

Université Catholique de Louvain-la-Neuve, Belgien

26.03.2009

**How to solve real-world****network problems!**

Universität Twente, Enschede, Niederlande

28.04.2009

**Hardness of finding small shortest path routing conflicts**

International Network Optimization Conference (INOC 2009), Pisa, Italien

**Ralf Borndörfer**

16.01.2009

**Mathematische Optimierung**

Workshop, Bundesarbeitsgemeinschaft der Aufgabenträger des SPNV, Hannover

25.03.2009

**Mathematische Optimierung**

Workshop,

Bundesamt für Güterverkehr, Köln

31.03.2009

**Rolling stock roster planning for rRailways**

MATHEON Center Days 2009, TU Berlin

07.04.2009

**Optimization overview**

Kick-off-Workshop, Trenitalia S.p.A., Rom, Italien

14.04.2009

**Umlaufoptimierung im SPFV**

Kick-off-Workshop, DB Fernverkehr AG,

Frankfurt am Main

19.05.2009

**Multikriterielle Umlauf- und Dienstplanoptimierung**

5. PSYRUS-Anwendertagung,

DB Stadtverkehr GmbH, Fulda

15.06.2009

**Optimal rotations for ICE high speed trains**

MATHEON-Beirat, TU Berlin

17.06.2009

**Integrierte Mautplanung und -kontrolle**

Workshop,

Bundesamt für Güterverkehr, Köln

07.07.2009

**Multicriteria optimization in****public transportation**

EURO 2009, Bonn

15.07.2009

**Projekt Trassenbörse, Teilprojekt****Mathematische Trassenoptimierung**

Projektpräsentation, TÜV Rheinland, Bonn

22.07.2009

**Gleichförmige Umlaufplanung**

Workshop, DB Fernverkehr AG,

Frankfurt am Main

13.08.2009

**Optimierung der Fahrzeugunlaufplanung****für die DB Fernverkehr AG**

Projektpräsentation, DB Fernverkehr AG,

Frankfurt am Main

25.08.2009

**Multicriteria optimization in public transportation**

ISMP 2009, Chicago, USA

22.09.2009

**Optimization overview**

Workshop,

IVU Traffic Technologies AG, Berlin

23.09.2009

**Combinatorial auctions**

ZIB, Berlin

23.09.2009

**Resource constrained shortest paths**

ZIB, Berlin

30.09.2009

**How to implement column generation procedures**

ZIB, Berlin

02.10.2009

**Duty scheduling**

ZIB, Berlin

03.10.2009

**Vehicle scheduling**

ZIB, Berlin

21.10.2009

**Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung für die DB Fernverkehr AG**

Projektpräsentation, DB Fernverkehr AG, Frankfurt am Main

06.11.2009

**Revenue maximization in public transport**

Posterpräsentation, LAGOS 2009,

Gramado, Brasilien

20.11.2009

**Multicriteria optimization in public transportation**

GOR Workshop 83: Mathematical

Optimization in People Transportation &amp;

Column Generation in Airlines, Rail &amp; Bus

Optimization Systems, Bad Honnef

27.11.2009

**Die Abteilung Optimierung**

Workshop, Daimler AG, Stuttgart

30.11.2009

**Planung optimieren und automatisieren – oder die Quadratur des Kreises**

IVU Konferenz 2009: IT im ÖPV, Berlin

**Manfred Brandt**

08.07.2009

**Insensitivity bounds for the moments of the sojourn times in M/GI systems under state-dependent processor sharing**

European Conference on Operational

Research 2009, Bonn

**Alexander Bujotzek**

27.05.2009

**Conformation dynamics based calculations on the entropies of multivalent spacers**

Molecular Kinetics 2009,

Posterpräsentation, Berlin

08.09.2009

**Calculation of entropy differences of multivalent spacers**

Sfb-765 Doktoranden-Workshop,

Posterpräsentation, Berlin

**Sven Burger**

18.04.2009

**Finite-element simulations of light propagation through subwavelength apertures in metal films**

XVIII International Workshop on

Optical Waveguide Theory and

Numerical Modelling (OWTNM), Jena

16.06.2009

**3D FEM simulation of light scattering of metallic nanostructures (invited)**

SPIE Modeling Aspects in

Optical Metrology, München

08.07.2009

**Simulating plasmonic devices with JCMwave's FEM package JCMsuite**

5th Workshop on Numerical Methods

for Optical Nanostructures,

ETH Zürich, Schweiz

16.09.2009

**Reduced basis method for computational lithography**

SPIE Photomask Technology,

Monterey, USA

18.09.2009

**Simulating nanooptical devices with JCMwave's FEM package JCMsuite**

Lawrence Berkeley National Laboratory,

Berkeley, USA

30.10.2009

**Numerical investigation of silicon-on-insulator 1D photonic crystal microcavities**

Second International Workshop on

Theoretical and Computational Nano-

Photonics, Bad Honnef

**Carlos Cardonha**

06.03.2009

**A binary quadratic programming approach to the vehicle positioning problem**

HPSC09, Hanoi, Vietnam

08.07.2009

**Solving the vehicle positioning problem**

EURO 2009, Bonn

24.08.2009

**A non-linear approach to the vehicle positioning problem**

ISMP 2009, Chicago, USA

04.11.2009

**A set partitioning approach to shunting**

LAGOS 2009, Gramado, Brasilien

**Wolfgang Dalitz**

24.06.2009

**Internetsperren**

Treffen der behördlichen Datenschutz-

beauftragten der wissenschaftlichen

Einrichtungen Berlins, ZIB, Berlin

**Vincent Dercksen**

01.07.2009

**Automatic alignment of stacks of filament data**

IEEE International Symposium on

Biomedical Imaging: From Nano to Macro,

Boston, USA

07.09.2009

**3D mapping of synaptic connections within "in silico" microcircuits of full compartmental neurons in extended networks on the example of VPM axons projecting into S1 of rats.**

2nd INCF Congress of Neuroinformatics,

Pilsen, Tschechien

**Peter Deuffhard**

27.02.2009

**Mathematik in der Medizin: Krebstherapie Hyperthermie und Mund-Kiefer-Gesichts-Chirurgie**

Vernetzungsworkshop Naturwissen-

schaften, Hans-Böckler-Stiftung Berlin

03.03.2009

**Conformation dynamics in computational drug design**

4th International Conference on

High Performance Scientific Computing,

Hanoi, Vietnam

07.05.2009

**Towards adaptive integration of dynamical contact problems**

Mathematics Colloquium, DAMTP, Center

for Mathematical Sciences, University of

Cambridge, Vereinigtes Königreich

27.05.2009

**Adaptive methods in conformation dynamics**

International Workshop on Molecular

Kinetics 2009, FU Berlin

03.06.2009

**Towards adaptive numerical integration of dynamical contact problems**

Max-Planck-Institut, Leipzig

03.06.2009

**Mathematik in Hollywood**

Öffentlicher Vortrag, Mathematisches

Institut, Universität Leipzig

09.06.2009

**Towards adaptive numerical integration of dynamical contact problems**

Seminar, Sonderforschungsbereich 611,

Universität Bonn

26.06.2009

**Mathematik und Medizin „Mathematik hinter dem virtuellen Patienten“**

Symposium „Mathematik – die verborgene

Struktur unserer Welt“, Stiftung Deutsches

Technikmuseum Berlin

28.07.2009

**Conformation dynamics in computational drug design**

Hamilton Institute Seminar Series, National

University of Ireland, Dublin, Irland

14.09.2009

**Mathematische Systembiologie am ZIB**

6. Treffpunkt Bioinformatik: Bioinformatik

und Systembiologie – vom Detail zur Kom-

plexität, Berlin

19.09.2009

**Towards adaptive numerical integration of dynamical contact problems**

7th International Conference Numerical

Analysis and Applied Mathematics 2009

(ICNAAM 2009),

Rethymno, Kreta, Griechenland

25.09.2009

**Medical simulation challenges mathematical modelling**

Plenary talk, European Conference on

Complex Systems 2009 (ECCS 2009),

Mathematics Department, University of

Warwick, Vereinigtes Königreich

**Ivan Dovica**

19.03.2009

**Approach to robust tail assignment**

Karls-Universität, Prag, Tschechien

06.07.2009

**Column generation approach to robust tail assignment**

EURO XXIII, Bonn

26.08.2009

**Column generation approach to robust tail assignment**

ISMP 2009, Chicago, USA

17.09.2009

**Column generation approach to robust tail assignment**

Conference on Transportation Scheduling

and Disruption Handling 2009, Prato, Italien

20.11.2009

**Column generation approach to robust tail assignment**

GOR Workshop 83: Mathematical

Optimization in People Transportation &amp;

Column Generation in Airlines, Rail &amp; Bus

Optimization Systems, Bad Honnef

**Andreas Eisenblätter**

18.02.2009

**An interference coupling model for adaptive soft frequency reuse in OFDMA/LTE networks**

COST2100/Socrates-Treffen,

TU Braunschweig

10.03.2009

**Mathematische Optimierung in der Praxis**

Besuch des MATHEON durch Finanzsenator

Sarrazin, TU Berlin

14.07.2009

**Foundations of automatic****WCDMA radio network planning**

PhD Course in Telecommunication,

Universität Malaga, Spanien

**Hilde Franck**

14.09.2009

**Fernleihe im KOBV**

Workshop für Mitarbeiter des Verbundes

der Öffentlichen Bibliotheken Branden-

burgs, Potsdam

**Armin Fügenschuh**

22.04.2009

**Discrete optimization: past and present**

German-American Frontiers of Engineering

Symposium 2009, Potsdam

25.06.2009

**Routing cars in rail freight service**

Dagstuhl Seminar 09261/1: Models and

Algorithms for Optimization in Logistics,

Schloß Dagstuhl

08.07.2009

**The coolest path problem EURO 2009,**

23rd European Conference on Operational

Research, Bonn

21.07.2009

**Mathematische Optimierung bei der Entwicklung spaltwalzfähiger Produkte im DFG-Sonderforschungsbereich 666**

Arbeitsgruppenseminar Diskrete

Optimierung an der

Technischen Universität Braunschweig

27.08.2009

**Solving nonlinear engineering problems with piecewise-linear approximation techniques**

ISMP 2009, Chicago, USA

20.11.2009

**Scheduling of school buses**

83. GOR-Arbeitsgruppensitzung Praxis

der mathematischen Optimierung, Logistik

und Verkehr, Bad Honnef

**Hans-Florian Geerdes**

29.01.2009

**Schöner telefonieren: Planung von Mobilfunknetzen mit Mathematik**

Projekttag, OSZ Teltow-Fläming,

Ludwigsfelde

17.02.2009

**An interference coupling model for adaptive soft frequency reuse in OFDMA/LTE networks**

Cost 2100 7th MCM, Braunschweig

04.03.2009

**UMTS radio network planning: mastering cell coupling for capacity optimization**

KiVS 2009, Kassel

19.03.2009

**An interference coupling model for adaptive soft frequency reuse in OFDMA/LTE networks**

ITG FG 5.2.1 Workshop „Ressource Alloca-

tion in Wireless Networks“, TU Chemnitz

**Joanna Geibig**

19.02.2009

**Availability of data in locality-aware unreliable networks**

Metrik-Forschungsseminar,

Berlin-Adlershof

08.05.2009

**Data availability in locality aWare unreliable networks**

Metrik-Evaluierungsworkshop, Döllnsee

20.06.2009

**Availability of data in locality-aware unreliable networks**

The Second International Conference on

Advances in Mesh Networks (MESH 2009)

Athen-Glyfada, Griechenland

16.07.2009

**Self-organized data replication for wireless multihop ad-hoc networks**  
Metrik-Forschungsseminar,  
Berlin-Adlershof

21.11.2009

**Self-organized data replication for wireless multihop ad-hoc networks**  
Metrik-Evaluierungsworkshop, Döllnsee

10.12.2009

**Gossiping in wireless ad-hoc networks**  
Metrik-Forschungsseminar,  
Berlin-Adlershof

---

**Ambros Gleixner**

06.07.2009

**Using Lagrangean relaxation of resource constraints for open pit mining production scheduling**  
EURO XXIII, Bonn

26.08.2009

**Using Lagrangean relaxation of resource constraints for open pit mining production scheduling**  
ISMP 2009, Chicago, USA

01.10.2009

**Solving large-scale open pit mining production scheduling problems by integer programming**  
DMV Studierendenkonferenz 2009, Bochum

28.09.2009

**Open pit mine production scheduling.**  
IP modelling and solution techniques  
ZIB, Berlin

---

**Susanne Gottwald**

02.10.2009

**Planning teams with semantic technologies**  
GI-Jahrestagung Informatik 2009 –  
Im Focus das Leben, Lübeck

30.11.2009

**Die Wissensberechnungsmaschine Wolfram|Alpha**  
ZIB, Berlin

---

**Martin Grötschel**

16.01.2009

**Mathematische Optimierung**  
Bundesarbeitsgemeinschaft der Aufgabenträger im Schienenpersonennahverkehr (BAGSPNV), Hannover

22.01.2009

**Combinatorial optimization in action**

MathAcrossCampus Colloquium,  
University of Washington, Seattle, USA

02.02.2009

**Mathematik und Telekommunikation**  
Mathematisches Kolloquium,  
Universität Kassel

06.02.2009

**Practicing combinatorial optimization today**  
ORBEL'09 – the 23rd Belgian Conference on Operations Research, Löwen, Belgien

11.02.2009

**Überlegungen zur Algorithmengeschichte**  
Festveranstaltung zur Verabschiedung von  
Eberhard Knobloch, TU Berlin

17.02.2009

**Why do I do mathematics?**  
BMS Days, Berlin

02.03.2009

**Combinatorial problems in infrastructure planning**  
4th International Conference on High Performance Scientific Computing HPSC 2009, Hanoi, Vietnam

04.03.2009

**Mathematics in everyday life**  
Vietnam National University,  
Hanoi, Vietnam

12.03.2009

**E-Learning and the working mathematician**  
Tagung GML2 2009 – Grundfragen des multimedialen Lehrens und Lernens, Berlin,  
12.–13.03.2009, Berlin

09.04.2009

**Path finding problems**  
Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing of the Chinese Academy of Sciences,  
Peking, China

22.04.2009

**Mathematical aspects of infrastructure planning**  
Annual Meeting of the Chinese Mathematical Society, Xiamen City, China

29.05.2009

**Making good use of railroad tracks**  
**INTEGER PROGRAMMING AT CORE,**  
May 27-29, 2009 Louvain-La-Neuve, Belgien

03.06.2009

**Schlüsseltechnologie Mathematik**  
Adolf-Martens-Kolloquium der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung,  
Berlin

17.06.2009

**Employing integer programming in telecommunication and other application areas**  
Faculty of Electrical Engineering of

**the Czech Technical University and Tekelec R&D department,** Vorlesungsreihe „Brilliance in Innovation“, Prag, Tschechien

08.09.2009

**Modellieren, Simulieren, Optimieren: Was ist das aus mathematischer Sicht?**  
ProcessNet Jahrestagung 2009, Mannheim

02.10.2009

**Zuverlässige und kostengünstige Telefonnetze: Mathematische Modellierung und Optimierung in der Telekommunikation**  
Jahrestagung der Leopoldina, Halle

09.12.2009

**Implementing optimization methods in public transport: the reality shock**  
TRANSLOG Transportation and Logistics Workshop, Renāca, Chile

11.12.2009

**Railway track auctioning**  
TRANSLOG Transportation and Logistics Workshop, Renāca, Chile

---

**David Günther**

17.04.2009

**Extraction of actin filaments using topological methods**  
BioPhys Seminar MPI Biochemistry,  
München, Germany

17.07.2009

**Separatrix persistence: extraction of salient edges on surfaces using topological methods**  
Symposium on Geometry Processing 2009,  
Berlin, Germany

28.11.2009

**Automatic reconstruction of actin filaments**  
Retreat MPI Biochemistry, Seeon, Germany

---

**Fiete Haack**

08.08.2009

**Representative spectral clustering for large data sets**  
GPSDAA2009 German Polish Symposium on Data Analysis and its Applications,  
Aachen

---

**Hans-Christian Hege**

11.01.2009

**Reconstruction of morphologies in bioimaging**  
FEI Eindhoven, Niederlande

14.05.2009

**Data analysis and visualization in life**

sciences

Department of Physiology, Anatomy and Genetics, University of Oxford, Vereinigtes Königreich

18.06.2009

**Features in uncertain data**  
Seminar „Scientific Visualization“,  
Schloß Dagstuhl

19.06.2009

**Reconstruction, representation, utilization and visualization of morphologies**  
Max-Planck-Institut für Informatik/  
Universität Saarbrücken

21.06.2009

**Features in uncertain tensor data**  
**Seminar „Visualization and Processing of Tensor Fields“,**  
Schloß Dagstuhl

23.07.2009

**The role of visualization in modeling large, high-resolution-neuronal networks**  
2nd International Workshop on Visualization in Medicine and Life Sciences (VMLS 2009), Bremerhaven

23.09.2009

**Datenvisualisierung in der Schule?**  
(Hauptvortrag), INFOS 2009 – 13. GI-Fachtagung Informatik und Schule, FU Berlin

22.10.2009

**Visualization of quantum phenomena: perspectives and limits**  
Workshop „Quantum Dynamic Imaging“,  
Centre de Recherches Mathématiques (CRM), Montreal, Kanada

---

**Stefan Heinz**

31.05.2009

**Using model counting to find optimal distinguishing tests**  
CPAIOR 2009, Tepper School of Business  
Carnegie Mellon University,  
Pittsburgh, PA, USA

02.07.2009

**Nonlinear pseudo-boolean optimization: relaxation or propagation?**  
SAT 2009, Swansea University,  
Swansea, Wales, Vereinigtes Königreich

21.08.2009

**The flexibility of the constraint integer programming solver SCIP**  
MOPTA 2009, Lehigh University,  
Bethlehem, PA, USA

28.08.2009

**Solving steel mill slab problems with branch-and-price**  
ISMP 2009, Chicago, USA

22.09.2009

**Basic concepts of SCIP**  
ZIB, Berlin

10.11.2009

**(Winning) two and a half competitions 2009**  
Optimization Seminar ZIB, Berlin

---

**Julian Heise**

09.09.2009

**A reporting framework for Verde,**  
zusammen mit Stefan Lohrum, 4th IGeLU  
Conference, Helsinki, Finnland

---

**Benjamin Hiller**

21.04.2009

**Elevator group control using exact reoptimization algorithms**  
Universität Maastricht, Niederlande

24.06.2009

**Reoptimization algorithms for passenger elevator control**  
Seminar „Models and Algorithms for Optimization in Logistics“,  
Schloß Dagstuhl

29.06.2009

**Stochastic dominance analysis of online bin coloring algorithms**  
MAPSP 2009, Kerkrade, Niederlande

27.08.2009

**Exact reoptimization algorithms for the control of elevator groups**  
ISMP 2009, Chicago, USA

01.10.2009

**Online optimization, elevator and service vehicle scheduling**  
ZIB, Berlin

---

**Nam Dung Hoang**

02.03.2009

**Cost allocation problem: fair ticket prices in public transport**  
HPSC 2009, Hanoi, Vietnam

---

**Mikael Höggqvist**

19.02.2009

**Parallel data analysis with MapReduce**  
Potsdam

---

**Dagmar Kainmüller**

16.06.2009

**Automatic 3D geometry reconstruction**

from image data

Workshop Anatomical Models, INRIA  
Sophia Antipolis, Frankreich

05.09.2009

**An articulated statistical shape model for accurate hip joint segmentation**  
31st Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, Minneapolis, Minnesota, USA

---

**Jens Kasten**

24.02.2009

**On the extraction of long-living features in unsteady fluid flows**  
TopolnVis 2009, Snowbird, Utah, USA

03.04.2009

**On the extraction of long-living features in unsteady fluid flows**  
Doktorandenkolloquium der Sonderforschungsbereiche SFB 557 und 686, Loccum

07.05.2009

**Merkmalsbasierte Analyse und Vergleich von Grobstrukturen in parameterabhängigen Strömungen**  
Statusseminar 2009 des SFB 557, Berlin

17.11.2009

**Localized finite-time Lyapunov exponent for unsteady flow analysis**  
Vision, Modeling, and Visualization  
Workshop 2009 in Braunschweig

---

**Uta Kaminsky**

12.02.2009

**Das ERM-System Verde**  
Staatsbibliothek zu Berlin, Kolloquium für  
Berliner Bibliotheksreferendare, ZIB, Berlin

21.04.2009

**Das Verde-Statistik-Modul**  
3. FAK-Konsortialtag „Nutzungsdaten –  
Raum für Kreativität?“  
Hertie School of Governance

03.06.2009

**Electronic Resource Management mit Verde von Ex Libris**  
Standvortrag beim 98. Deutschen  
Bibliothekartag, Erfurt

---

**Corinna Klapproth**

05.05.2009

**Auf dem Weg zur adaptiven numerischen Integration von dynamischen Kontaktproblemen**  
WIAS, Berlin

**Torsten Klug**

02.07.2009

**Improving the performance of elevator systems using exact reoptimization algorithms**

MAPSP 2009, Kerkrade, Niederlande

03.08.2009

**Improving the performance of elevator systems using exact reoptimization algorithms**

PhD course on Applications of Vehicle Routing, Universität Aarhus, Dänemark

**Thorsten Koch**

06.03.2009

**Extending SCIP to solve quadratic MINLPs**

4th International Conference on High Performance Scientific Computing (HPSC 2009), Hanoi, Vietnam

10.06.2009

**LP/MIP/MINLP challenges**

MIP 2009, University of California, Berkeley, USA

24.08.2009

**SCIP/SoPlex/Zimpl –**

**The ZIB optimization suite**

ISMP 2009, Chicago, USA

22.09.2009

**Real world data**

ZIB, Berlin

**Michael Koppitz**

22.10.2009

**Visualization of data from quantum mechanical simulations**

Quantum Dynamic Imaging,

Montreal, Kanada

23.09.2009

**Der Sound des Vakuums**

Urania Potsdam

**Monika Kuberek**

12.02.2009

**Der KOBV – der regionale Bibliotheksverbund für Berlin und Brandenburg.**

**Zielsetzungen, Selbstverständnis,**

**Strategien für die Zukunft**

Kolloquium für Berliner Bibliotheksreferendare, ZIB, Berlin

**Anja Kuß**

10.06.2009

**Visual accentuation of spatial relationships between filamentous and voluminous surface structures**

Poster Session at 11thEurographics/IEEE Symposium on Visualization, Berlin

07.09.2009

**Using ontologies for the visualization of hierarchical neuroanatomical structures**

2ndINCF Congress of Neuroinformatics, Pilsen, Tschechien

26.11.2009

**Knowledge representation for digital brain atlases**

1stWorkshop of the Working Group

„Ontologies in Biomedicine and the Life Sciences“

**Hans Lamecker**

01.01.2009 -31.12.2009

**Forschungsaufenthalt**

Asclepios Research Project,

INRIA Sophia Antipolis, Frankreich

**Stefan Lohrum**

18.03.2009

**Bibliotheken virtualisiert – Container mit Aussicht!**

10. Sun Summit „Digitalisieren, Archivieren, Publizieren“, Kassel

11.05.2009

**Primo-Einführung im KOBV**

Aleph-DACH-Tagung der deutschsprachigen Aleph-Anwender, Köln

03.06.2009

**BibDir – eine Informationsinfrastruktur der deutschen Bibliotheksverbände und ihre Nutzung in der Praxis**

Workshop Oracle-Administration, FU Berlin

03.07.2009

**Geoinformationen im KOBV-Bibliothekenführer**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

09.09.2009

**A reporting framework for Verde**

zusammen mit Julian Heise, 4th IGeLU

Conference, Helsinki, Finnland

09.09.2009

**Consortial Primo installation at KOBV**

4th IGeLU Conference, Helsinki, Finnland

22.09.2009

**Technik und Betrieb der KOBV-SFX-Instanz, SFX-Anwendungen in Bibliotheken,**

Fachhochschule Köln Geisteswissenschaftliches Zentrum (GWZ)

14.10.2009

**Vom Aufbau des gemeinsamen Verbundkataloges von BVB und KOBV – ein Statusbericht**

(zusammen mit Beate Rusch) SISIS-Anwenderforum Berlin-Brandenburg, Potsdam

**Gunar Maiwald**

18.02.2009

**SingleSignOn für Bibliotheken:**

**Gemeinsames Entwicklungsprojekt von BVB und KOBV**

Treffen des AK MetaDirectory im BVB, Würzburg

13.06.2009

**Literaturverwaltung auf deinem Desktop**

9. Lange Nacht der Wissenschaften, ZIB, Berlin

03.07.2009

**Rechtmanagement mit Shibboleth:**

**Zwischenstand zum gemeinsamen Entwicklungsprojekt von KOBV und BVB**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

**Maren Martens**

21.05.2009

**A simple greedy algorithm for the k-disjoint Flow Problem**

6th Annual Conference on Theory and Applications of Models of Computation

(TAMC), Changsha, China

27.08.2009

**Dimensioning multi-level telecommunication networks:**

**integer programming approaches**

ISMP 2009, Chicago, USA

13.11.2009

**2-interConnected facility location**

Colloquium on Combinatorics, Magdeburg

**Marika Neumann**

31.03.2009

**Service Design in public transport**

MATHEON CenterDays, TU Berlin

23.06.2009

**Line planning and connectivity**

Seminar, Dagstuhl, Schloß Dagstuhl

24.08.2009

**The steiner connectivity problem**

ISMP 2009, Chicago, USA

02.10.2009

**Line planning in public transport**

ZIB, Berlin

**Winfried Neun**

22.09.2009

**Was kommt nach Google? – Trends bei Suchmaschinen**

DMV/OEMG-Tagung Graz, Österreich

**Sebastian Orłowski**

30.03.2009

**Integrated planning of multi-layer telecommunication networks**

MATHEON-Zentrumstage, TU Berlin

28.04.2009

**On the complexity of column generation in survivable network design with pathbased survivability mechanisms**

International Network Optimization

Conference INOC 2009, Pisa, Italien

**Wolfgang Peters-Kottig**

12.02.2009

**Services des KOBV**

**aus Benutzersperspektive**

Kolloquium für Berliner Bibliotheksreferendare, ZIB, Berlin

03.06.2009

**Ranking und Impact-Faktor von Zeitschriften – ein Projekt im Rahmen des Masterstudiums der FH Köln**

98. Deutscher Bibliothekarstag, Erfurt

13.06.2009

**Forschen über Forschung – Wie wird Qualität von Wissenschaft(lern) gemessen**

9. Lange Nacht der Wissenschaften, ZIB, Berlin

03.07.2009

**Literaturverwaltungsprogramme**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

**Christoph Petz**

11.06.2009

**Hierarchical vortex regions in swirling flow**

EuroVis 2009, Berlin

**Jan Pomplun**

19.03.2009

**Reduced basis method for fast solution of electromagnetic scattering problems (invited)**

PTB Seminar on scatterometry and ellipsometry on structured surfaces,

Braunschweig

23.03.2009

**Numerical simulation of tilted wave lasers**

DPG Frühjahrstagung, Dresden

16.06.2009

**Reduced basis method for fast and robust simulation of electromagnetic scattering problems**

SPIE Europe, Optical Metrology, München

05.08.2009

**Finite element analysis of novel semiconductor lasers**

International nano-optoelectronic Workshop (iNOW), Stockholm, Schweden

16.09.2009

**Accelerated a posteriori error**

**estimation for the reduced basis**

**method with application to 3D electromagnetic scattering problems**

Model Reduction of Parametrized Systems (MoRePaS), Münster

**Wolfgang Pyszkalski**

30.03.2009

**Integrated Planning of Multi-layer Telecommunication Networks**

MATHEON-Zentrumstage, TU Berlin

**Christian Raack**

16.01.2009

**Finding embedded multi-commodity flow submatrices in MIPs and separation of cutset inequalities**

13th Combinatorial Optimization

Workshop, Aussois, Frankreich

27.04.2009

**A packing integer program arising in two-layer network design**

International Network Optimization

Conference (INOC), Pisa, Italien

15.–26.06.2009

**Gastaufenthalt**

RWTH Aachen

25.08.2009

**Exploiting multi-commodity flow structures in mixed integer programs**

ISMP 2009, Chicago, USA

22.09.2009

**Introduction to porta**

ZIB, Berlin

16.–27.11.2009

**Gastaufenthalt**

RWTH Aachen

**Raluca Radu**

03.07.2009

**ReMaS – Rechte-Management-System im KOBV-Volltextserver**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

**Alexander Reinefeld**

11.02.2009

**A self-managing, transactional data store**

Google Faculty Summit, Zürich

15.02.2009

**The future of grid computing**

Seminar, Schloß Dagstuhl

09.03.2009

**A scalable, transactional data store for future internet services**

Kolloquium, European Media Lab, Heidelberg

24.03.2009

**Future of Storage and Data Management**

Sun Education Conference, Berlin

04.05.2009

**Implementing fault tolerant services on structured overlay networks – part 1 of the messy details**

Seminar, Schloß Dagstuhl

12.05.2009

**Distributed data management for future internet services**

Tag der Informatik, HU Berlin

**Jan Reininghaus**

23.02.2009

**Combinatorial 2D vector field topology extraction and simplification**

TopoInVis 2009, Snowbird, Utah, USA

**Markus Reuther**

08.07.2009

**Distance-constrained vehicle routing**

EURO 2009, Bonn

23.09.2009

**Resource constrained shortest paths**

Übung, ZIB, Berlin

30.09.2009

**How to implement column generation Procedures**

Übung, ZIB, Berlin

**Susanna Röblitz**

09.02.–10.03.2009

**Gastaufenthalt in der Arbeitsgruppe von Vijay Pande**  
Universität Stanford, USA

04.03.2009

**Hierarchical refinement in conformation dynamics**

SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Miami, USA

27.05.2009

**Statistical error estimation & hierarchical refinement in conformation dynamics**,  
molecular kinetics 2009,

Posterpräsentation, Berlin

18.09.2009

**Computing expectation values for molecular quantum dynamics**  
ICNAAM, Rethymnon, Griechenland

**Beate Rusch**

03.06.2009

**Vom Aufbau des gemeinsamen Verbundkataloges von BVB und KOBV**  
98. Deutscher Bibliothekarstag, Erfurt

03.07.2009

**Kärnerarbeit Datenmigration**

7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

08.09.2009

**Our Wiki at EL Commons – A second visit**  
4th IGeLU Conference, Helsinki, Finnland

09.12.2009

**Gemeinsam auf dem Weg zum Katalogisierungssystem der Zukunft**  
9. BVB-Verbundkonferenz Goethe-Forum München

14.10.2009

**Vom Aufbau des gemeinsamen Verbundkataloges von BVB und KOBV – ein Statusbericht**  
(zusammen mit Stefan Lohrum) SISIS-Anwenderforum Berlin-Brandenburg, Potsdam

**Carlos Saro**

02.03.2009

**Digitale Langzeitarchivierung in Museen und Archiven – Konzepte und Strategien**  
Nestor-Konferenz, Leipzig

12.10.2009

**Sammlungen im Netz – Was und wem bringt das etwas?**

Herbsttagung zur Museumsdokumentation, ZIB, Berlin

**Olga Scharkoi**

26.03.2009

**Computationally aided design of opioids**  
Forschungsseminar „Inflammation and pain“, Charité Campus Benjamin Franklin, Berlin

**Anton Schiela**

27.01.2009

**Interior point methods in function space – Newton path-following and adaptivity**  
Workshop, Oberwolfach

10.02.2009

**Algorithmic variants of interior point methods in function space**

GAMM 2009, Danzig, Polen

24.04.2009

**Techniques for the analysis of semi-smooth Newton methods**

Kolloquium, TU Chemnitz

28.05.2009

**Techniques for the analysis of semi-smooth Newton methods**

Kolloquium, TU Berlin

04.06.2009

**Inexact algorithms in function space and adaptivity**  
GAMM-Workshop, Trier

12.06.2009

**Inexact algorithms in function space and adaptivity**  
Kolloquium, HU Berlin

27.07.2009

**State constrained optimal control with states of low regularity**  
IFIP 2009, Buenos Aires, Brasilien

26.08.2009

**Interior point methods in function space for hyperthermia treatment Planning**  
ISMP 2009, Chicago, USA

15.09.2009

**Interior point methods in function space for hyperthermia treatment Planning**  
BFG 2009, Löwen, Belgien

20.10.2009

**Techniques for the analysis of path-following methods in function space**

Kolloquium,  
RICAM Linz, Österreich, 10/2009

04.12.2009

**Regularity issues in state constrained optimal control**  
WIAS, Berlin, 12/2009

**Florian Schintke**

04.05.2009

**Implementing fault tolerant services on structured overlay networks – part 2 of the messy details**

Seminar, Schloß Dagstuhl

09.06.2009

**Scalaris – methods for a globally distributed key-value store with strong consistency**

Eingeladener Vortrag, 2nd International-Workshop on Data-aware Distributed Computing at HPDC09, München

**Thomas Schlechte**

16.01.2009

**Projekt Trassenbörse**

Bundesarbeitsgemeinschaft Schienenpersonennahverkehr (BAG-SPNV), Hannover

10.02.2009

**Optimisation of macroscopic train schedules via TS-OPT**

SBB, Zürich, Schweiz

12.02.2009

**Optimisation of macroscopic train schedules via TS-OPT**

3rd International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis (ISROR), Zürich, Schweiz

03.05.2009

**Discrete mathematics for the TTP**  
DFG-Graduiertenkolleg AlgoSyn, RWTH Aachen

06.07.2009

**A bundle approach for solving large scale train timetabling problems**  
23rd European Conference on Operational Research, Bonn

15.07.2009

**Mathematische Trassenoptimierung**  
TÜV Rheinland Consulting GmbH und BMWi, Köln

25.08.2009

**A bundle approach for path coupling problems**  
ISMP 2009, Chicago, USA

17.09.2009

**Branch and price for the train timetabling problem**

Conference on transportation scheduling and disruption handling, Prato, Italien

20.10.2009

**Modelling and optimising the Simplon corridor**

SBB, Bern, Schweiz

30.10.2009

**Exercise: how to implement column**

**generation procedures (part 3)**

ZIB, Berlin

03.11.2009

**Lecture: railway track allocation**

ZIB, Berlin

03.11.2009

**Exercise: railway track allocation**

ZIB, Berlin

20.11.2009

**Branch and price for the train timetabling problem**

GOR Workshop – Mathematical optimisation in transportation – airline, public transport, railway handling, Bad Honnef

**Frank Schmidt**

02.03.2009

**Transparent boundary conditions for the Schrödinger equation based on the pole condition (invited)**

SIAM CSE, Miami, USA

15.06.2009

**Design of nano-photonic devices**

MATHEON-Beirat

16.09.2009

**Reduced basis method for 3D electromagnetic scattering problems**  
Oberseminar Institute of Analysis and Scientific Computing (invited), EPFL Lausanne

**Heiko Seim**

01.10.2009

**A system for unsupervised extraction of orthopaedic parameters from CT data**  
GI Workshop Softwareassistenten – Computerunterstützung für die medizinische Diagnose und Therapieplanung, Lübeck

28.11.2009

**Rapid generation of models – The DeSSOS approach**

Patient-centred orthopaedic surgery, challenges, emerging technologies and future concepts, EU DeSSoS Symposium, Southampton, Vereinigtes Königreich

**Rüdiger Stephan**

14.01.2009

**Polyhedral aspects of cardinality constrained combinatorial optimization**  
13th Combinatorial Optimization Workshop, Aussois, Frankreich

17.–18.03.2009

**Gastaufenthalt**

Center for Operations Research and Econometrics, Université catholique de

Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien

17.03.2009

**Polyhedral aspects of cardinality constrained combinatorial optimization**  
Mathematical Programming Seminar, Center for Operations Research and Econometrics, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien

04.06.2009

**Classification of 0/1-facets of the hop constrained path polytope defined on an acyclic digraph**

Cologne-Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization Ecole Polytechnique and CNAM, Frankreich

03.–07.08.2009

**Gastaufenthalt**

Center for Operations Research and Econometrics, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien

27.08.2009

**Characterization of 0/1/-1 facets of the hHop constrained path polytope by dynamic programming**  
ISMP 2009, Chicago, USA

14.–17.09.2009, 21.–24.09.2009

**Gastaufenthalt**

Center for Operations Research and Econometrics, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien

05.–09.10.2009, 19.–23.10.2009

**Gastaufenthalt**

Center for Operations Research and Econometrics, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien

**Hinnerk Stüben**

11.06.2009

**A short introduction to parallel and GPU computing Mini-workshop: simulation on GPU**

Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig

22.09.2009

**Die neuen SGI ICE-Systeme am HLRN – Rechenleistung von Anwendungen**  
Treffen der Deutschen SGI User Group (DESUG), ZIB Berlin

**Elmar Swarat**

20.10.2009

**Projekt Trassenbörse, Teilprojekt MTO Simplon**

Arbeitsgruppentreffen bei der SBB, Bern, Schweiz

20.11.2009

**Polyedrische Untersuchungen für das PESP**  
Studierendenkonferenz Dies Mathematicus 2009, Institut für Mathematik, TU Berlin

04.12.2009

**Mikro-Makro-Transformation anhand des Simplon-Korridors**  
ZIB-interner Workshop

**Sascha Szott**

03.07.2009

**Ein Blick hinter die Kulissen des neuen KOBV-Volltextservers**  
7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

14.10.2009

**(Fast) alles unter einem Hut – die auf Lucene basierende Bibliotheks-suchmaschine des KOBV**  
25. SISIS-Anwenderforum Berlin-Brandenburg, Potsdam

07.12.2009

**(Fast) alles unter einem Hut – die auf Lucene basierende Bibliotheks-suchmaschine des KOBV**  
Workshop Suchmaschinenttechnologie für Bibliotheken, ZIB, Berlin

**Doreen Thiede**

03.07.2009

**KOBV-Volltextserver 2 live**  
7. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

07.12.2009

**Die LSE aus bibliothekarischer Sicht Workshop Suchmaschinenttechnologie für Bibliotheken**  
ZIB, Berlin

07.12.2009

**Auswertung der Umfrage zum Einsatz der LSE und Vorstellung eines Fragenkatalogs zum Einsatz von Suchmaschinenttechnologie in Berliner und Brandenburger Bibliotheken**  
Workshop Suchmaschinenttechnologie für Bibliotheken, ZIB, Berlin

**Marcus Weber**

14.01.2009

**Recent progress in conformation dynamics**  
eingeladener Vortrag, IMA Workshop on Chemical Dynamics, Minneapolis, USA

27.01.2009

**Calculation of entropy differences for multivalent spacers using conformation dynamics**

Kurzvortrag, SFB 765-Workshop, Berlin  
27.05.2009

**Adaptive methods in conformation dynamics II**  
eingeladener Vortrag, Molecular Kinetics 2009, Berlin  
17.06.2009

**Conformation dynamics in computational drug design**  
eingeladener Vortrag,  
Graduate School GRK 782,  
Georg-August-Universität Göttingen  
16.09.2009

**Domain decomposition in computational drug design**  
eingeladener Vortrag, Max-Planck Institute for Biophysical Chemistry,  
AG Helmut Grubmüller, Göttingen  
04.11.2009

**Spurenstoffe im Trinkwasser – Risikoqualifizierung im Rechner?**  
eingeladener Referent und Vorsitzender einer Diskussionsrunde, WaBoLu Fortbildungstagung für Wasserfachleute,  
UBA Berlin  
25.11.2009

**In-Silico-Toxikologie**  
eingeladener Vortrag, Workshop „Transformationsprodukte“, Wasserchemische Gesellschaft and DWA, Koblenz  
08.12.2009

**Conformation dynamics based calculations of the entropies of multivalent spacers,**  
eingeladener Vortrag, SFB 765-Symposium, Berlin

#### Martin Weiser

30.10.2009  
**Pointwise nonlinear scaling of cardioelectric equations**  
Bidomain 2009 SFB Workshop,  
Graz, Österreich  
26.08.2009

**On goal-oriented adaptivity for elliptic optimal control problems**  
International symposium of mathematical programming, Chicago, USA  
25.06.2009

**Pointwise nonlinear scaling for reaction-diffusion equations**  
TU München  
08.06.2009

**Adaptive integration of cardioelectric excitation**  
Mathematical modeling and computing in electrocardiology, Nantes, Frankreich

30.01.2009  
**On goal-oriented adaptivity in optimal control**

Conference numerical techniques for optimisation problems with PDE constraints, Oberwolfach

#### Axel Werner

05.06.2009  
**What is ... a flag vector?**  
„What is ...?“ – Seminar,  
Institut für Mathematik, FU Berlin  
22.09.2009

**Introduction to polymake**  
ZIB, Berlin

#### Roland Wessälly

24.06.2009  
**Model-based network optimization**  
Statusseminar 100GET  
16.12.2009

**Methoden zur Planung und Optimierung von FTTx-Netzen**  
ITG-Fachtagung Kommunikationskabelnetze

#### Kati Wolter

25.03.2009  
**Integer programming**  
PhD-meeting DFG Priority Programme „Algorithm Engineering“, Heringssand  
07.05.2009

**SCIP – solving constraint integer programs**  
Workshop „Algorithm Engineering for Integer Programming“,  
Christian-Albrechts-Universität zu Kiel  
03.06.2009

**Exact integer programming**  
Annual meeting DFG Priority Programme „Algorithm Engineering“, TU Dortmund  
24.08.2009

**Exact integer programming in SCIP**  
ISMP 2009, Chicago, USA  
26.09.2009

**Branching, presolving, and constraint handlers**  
ZIB, Berlin  
30.09.2009

**Cutting planes and primal heuristics**  
ZIB, Berlin

#### Stefan Zachow

11.01.–16.01.2009  
**Gastaufenthalt**  
vr.vis und SimVis GmbH, Wien, Österreich  
09.03.2009

**Computer-assisted, model-guided reconstruction of facial trauma**  
European Academy of Facial Plastic Surgery (EAFPS), 12. Winter Meeting in honour of Prof. G. Nolst-Trenite, Laax, Schweiz  
11.03.2009

**Analysis of mandibular shape variability: a statistical 3D shape model**  
European Academy of Facial Plastic Surgery (EAFPS), 12. Winter Meeting in honour of Prof. G. Nolst-Trenite, Laax, Schweiz  
24.07.2009

**Mathematical modeling in medicine**  
BSRT International Summer School on Innovative Approaches in Regenerative Medicine, Berlin-Brandenburg School for Regenerative Therapies (BSRT), zusammen mit Martin Weiser am ZIB  
15.10.2009

**Visual exploration of nasal airflow**  
IEEE VisWeek, Atlantic City, New Jersey, USA  
28.11.2009

**3D reconstruction of individual anatomy from medical image data Patient-centred orthopaedic surgery, challenges, emerging technologies and future concepts,**  
EU DeSSoS Symposium,  
Southampton, Vereinigtes Königreich

#### Lin Zschiedrich

19.01.2009  
**Numerical concepts beyond the PML method**  
MATHEON-Workshop Transparent boundary conditions, ZIB  
13.08.2009

**Computation of resonances for Maxwell's equations: transparent boundary conditions and goal oriented error estimation (invited)**

Workshop Linear and Nonlinear Eigenproblems for PDEs, Oberwolfach  
27.10.2009

**Resonanzen der Schrödingergleichung**  
Disputation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin

#### VORLESUNGEN UND SEMINARE

**Artur Andrzejak: HU Berlin**  
WS 08/09 Data Mining mit Anwendungen in der Finanzwirtschaft (Seminar)  
SS 09 Verteilte Systeme (Vorlesung und Übung)  
WS 09/10 Debugging und Fehlerdiagnose in Verteilten Systemen (Seminar)

**Wolfgang Baumann: Jacobs University Bremen**  
WS 08/09 Parallel Programming with MPI and OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs, zusammen mit Hinnerk Stüben)

**Wolfgang Baumann: TU Berlin**  
WS 08/09 Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Lehrveranstaltung, zusammen mit Hinnerk Stüben)

**Wolfgang Baumann: TU Hamburg-Harburg**  
SS 09 Parallel Programming Workshop (Kurs, zusammen mit Hinnerk Stüben)

**Wolfgang Baumann: ZIB Berlin**  
WS 08/09 Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Kurs, zusammen mit Hinnerk Stüben)

**Andreas Bley: TU Berlin**  
WS 08/09 Mathematical Tools for Engineering and Management (Vorlesung mit Rechnerübungen)

**Ralf Borndörfer: TU Berlin**  
SS 09 Methoden der nicht-differenzierbaren Optimierung (Seminar, zusammen mit Martin Grötschel und Markus Reuther)  
WS 09/10 Diskrete Optimierung (Projekt-Seminar, zusammen mit Armin Fügenschuh, Martin Grötschel, Benjamin Hiller und Elmar Swarat)

**Manfred Brandt: HU Berlin**  
SS 09 Ausgewählte Kapitel der Funktionentheorie (Vorlesung)

**Peter Deuffhard: FU Berlin**  
WS 08/09, SS 09 Oberseminar Scientific Computing (zusammen mit Carsten Carstensen (HUB), Herbert Gajewski (FUB/WIAS), Rupert Klein (FUB), Ralf Kornhuber (FUB), Volker Mehrmann (TUB), Sebastian Reich (Universität Potsdam), Konrad Polthier (FUB), Christof Schütte

(FUB), Joachim Sprekels (HU/WIAS), Fredi Tröltzsch (TUB), Harry Yserentant (TUB))  
WS 08/09, SS 09 Seminar für Diplomanden und Doktoranden (zusammen mit Rupert Klein (FUB), Ralf Kornhuber (FUB), Christof Schütte (FUB))  
WS 08/09 Mathematische Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie (Projektseminar, zusammen mit Martin Weiser)  
SS 09 Numerik III: Numerical Solution of Partial Differential Equations (Vorlesung, zusammen mit Carsten Gräser (FUB))

**Armin Fügenschuh: TU Berlin**  
WS 09/10 Mathematical Tools for Engineering and Management (Vorlesung und Übung)  
WS 09/10 Diskrete Optimierung (Projekt-Seminar, zusammen mit Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Benjamin Hiller und Elmar Swarat)

**Martin Grötschel: TU Berlin**  
SS 09 Graphen- und Netzwerkalgorithmen (ADM I) (Vorlesung)  
SS 09 Methoden der nicht-differenzierbaren Optimierung (Blockseminar, zusammen mit Ralf Borndörfer und Markus Reuther)  
WS 09/10 Lineare und ganzzahlige Optimierung (ADM II) (Vorlesung)  
WS 09/10 Diskrete Optimierung (Projekt-Seminar, zusammen mit Ralf Borndörfer, Armin Fügenschuh, Benjamin Hiller und Elmar Swarat)  
WS 09/10 Combinatorial Optimization at Work (II) (Blockkurs am ZIB, gemeinsame Veranstaltung mit dem MATHEON und der BMS, zusammen mit Thorsten Koch)

**Hans-Christian Hege: Babelsberg Film School**  
WS 08/09 Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation (Vorlesung)  
SS 09 Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation (Vorlesung)

**Benjamin Hiller: TU Berlin**  
WS 09/10 Diskrete Optimierung (Projekt-Seminar, zusammen mit Ralf Borndörfer, Armin Fügenschuh, Martin Grötschel und Elmar Swarat)

**Mikael Höggqvist: HU Berlin**  
SS 09 Aktuelle Forschungsarbeiten im Peer-to-Peer-Computing (Seminar, zusammen mit Alexander Reinefeld)

**Ingrid Hotz: FU Berlin**  
WS 08/09 Introduction to Real-Time Volume Graphics (Proseminar)  
WS 08/09 Ausgewählte Themen aus der Visualisierung (Seminar)  
SS 09 Image Processing and Analysis (Vorlesung und Übung an der FU Berlin für Studenten der Informatik und Mathematik)  
WS 09/10 Introduction to Data Visualization (Proseminar)  
WS 09/10 Visualization Topics (Seminar)

**Thorsten Koch: TU Berlin**  
WS 09/10 Combinatorial Optimization at Work (II) (Blockkurs am ZIB, gemeinsame Veranstaltung mit dem MATHEON und der BMS, zusammen mit Martin Grötschel)

**Kathrin Peter: HU Berlin**  
SS 09 Fehlertolerante Codes für parallele Speichersysteme (Seminar, zusammen mit Alexander Reinefeld)

**Alexander Reinefeld: HU Berlin**  
SS 09 Aktuelle Forschungsarbeiten im Peer-to-Peer-Computing (Seminar, zusammen mit Mikael Höggqvist)  
SS 09 Fehlertolerante Codes für parallele Speichersysteme (Seminar, zusammen mit Kathrin Peter)  
WS 09/10 Programmierung von Hardwarebeschleunigern (Vorlesung und Praktikum, zusammen mit Thomas Steinke)  
WS 09/10 Forschungsseminar Parallele und Verteilte Systeme (Seminar)

**Markus Reuther: TU Berlin**  
SS 09 Methoden der nicht-differenzierbaren Optimierung (Seminar, zusammen mit Ralf Borndörfer und Martin Grötschel)

**Susanna Röblitz: FU Berlin**  
SS 09 Simulation von Biomolekülen (Vorlesung)  
WS 09/10 Fortgeschrittene Methoden in der Simulation von Biomolekülen (Seminar)

**Anton Schiela: FU Berlin**  
SS 09 Höhere Analysis (Vorlesung)  
SS 09 Numerik im Funktionenraum (Vorlesung)

**Thomas Steinke: HU Berlin**  
WS 09/10 Programmierung von Hardwarebeschleunigern (Vorlesung und Praktikum, zusammen mit Alexander Reinefeld)

**Rüdiger Stephan: TU Berlin**

**SS 09** Graphen- und Netzwerkalgorithmen (ADM I) (Übung)

**Hinnerk Stüben: HU Berlin**

**WS 09/10** Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler (Vorlesung)

**Hinnerk Stüben: Jacobs University Bremen**

**WS 08/09** Parallel Programming with MPI and OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs, zusammen mit Wolfgang Baumann)

**Hinnerk Stüben: TU Berlin**

**WS 08/09** Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Lehrveranstaltung, zusammen mit Wolfgang Baumann)

**Hinnerk Stüben: TU Hamburg-Harburg**

**SS 09** Parallel Programming Workshop (Kurs, zusammen mit Wolfgang Baumann)

**Hinnerk Stüben: ZIB Berlin**

**WS 08/09** Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Kurs, zusammen mit Wolfgang Baumann)

**Elmar Swarat: TU Berlin**

**WS 09/10** Diskrete Optimierung (Projekt-Seminar, zusammen mit Ralf Borndörfer, Armin Fügenschuh, Martin Grötschel und Benjamin Hiller)

**Andreas Tuchscherer:****HWR Berlin, Fachbereich Berufsakademie**

**WS 09/10** Graphentheorie (Vorlesung)

**Marcus Weber: FU Berlin**

**SS 09** Simulation von Biomolekülen (Vorlesung)

**SS 09** The Hybrid Monte Carlo Method (im Rahmen der Ringvorlesung im SFB 765)

**WS 09/10** Fortgeschrittene Methoden in der Simulation von Biomolekülen (Seminar)

**Martin Weiser: FU Berlin**

**WS 09/10** Numerische Methoden der stochastischen Optimierung (Seminar, zusammen mit Illia Horenko)

**WS 08/09** Mathematische Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie (Projektseminar, zusammen mit Peter Deuffhard)

**Axel Werner: TU Berlin**

**WS 09/10** Lineare und ganzzahlige Optimierung (ADM II) (Übung, zusammen mit KatiWolter)

**Kati Wolter: TU Berlin**

**WS 09/10** Lineare und ganzzahlige Optimierung (ADM II) (Übung, zusammen mit AxelWerner)

**MITVERANSTALTER  
AUSWÄRTIGER TAGUNGEN****Artur Andrzejak**

**10.–15.05.2009** Self-Healing and Self-Adaptive Systems, Seminar, Schloß Dagstuhl

**Wolfgang Dalitz**

**20.–25.09.09.2009** IuK-Fachgruppentagung, 17. Jahrestagung der DMV/ÖMG an der TU Graz

**Joanna Geibig**

**08.–10.06.2009** Metrik-Workshop des Informatik-Graduiertenkollegs 2009 in Dagstuhl, Schloß Dagstuhl

**Hans-Christian Hege**

**02.–05.02.2009** 17th International Conference in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision – WSCG 2009 (Member of the International Programme Committee), University of West Bohemia, Pilsen, Tschechien

**23.–24.02.2009** Topological Methods in Data Analysis and Visualization: Theory, Algorithms and Applications – TopoInVis'09 (Member of the International Programme Committee), Snowbird, Utah, USA

**10.–12.06.2009** Eurographics/IEEE Symposium on Visualization – EuroVis 2009 (Symposium Co-Chair), Berlin

**15.–17.07.2009** Symposium on Geometry Processing – SGP 2009 (Member of Local Organising Committee), Berlin

**22.–24.07.2009** Visualization in Medicine and Life Sciences 2009 – VMLS 2009 (Symposium Co-Chair), Bremerhaven

**01.10.2009** Workshop Softwareassistenten in der Medizin – Computerunterstützung für die medizinische Diagnose und Therapieplanung (Member of Program Committee), Jahrestagung der Gesellschaft für Informatik e. V. (GI), Universität Lübeck

**16.–18.11.2009** Vision, Modeling, and Visualization Workshop 2009 – VMV'09

(Member of the International Programme Committee), Braunschweig

**29.12.–02.12.2009** 2nd Workshop '3D Physiological Human' (Member of the International Programme Committee), Zermatt, Schweiz

**Mikael Höggqvist**

**09.–10.09.2009** DGSI workshop, ZIB, Berlin

**04.–05.11.2009** DGSI workshop, ZIB, Berlin

**Ingrid Hotz**

**10.–12.06.2009** Eurographics/IEEE Symposium on Visualization – EuroVis 2009 (Symposium Co-Chair), Berlin, Germany

**Ralf Kähler**

**10.–12.06.2009** Eurographics/IEEE Symposium on Visualization – EuroVis 2009 (Poster Chair), Berlin

**Wolfgang Pyszkalski**

**02.–03.12.2009** Storage Summit, Neue Techniken zur Bewältigung des Umganges mit sehr großen Datenmengen, Berlin

**Alexander Reinefeld**

**03.–08.05.2009** Fault Tolerance in High-Performance Computing and Grids, Seminar, Schloß Dagstuhl

**Susanna Röblitz**

**04.03.2009** Minisymposium „Domain Decomposition Methods in Molecular Dynamics“, SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Miami, USA

**Thomas Steinke**

**24.–26.03.2009** MRSC: Many-Core and Reconfigurable Supercomputing Conference, ZIB, Berlin

**Marcus Weber**

**04.03.2009** Minisymposium „Domain Decomposition Methods in Molecular Dynamics“, SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Miami, USA

**Stefan Zachow**

**23.–27.06.2009** Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS) 2009 (Member of the Programme Committee), Berlin

**TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB****GASTVORTRÄGE**

**26.01.2009**

**Patrick Baudisch**

(Hasso-Plattner-Institut, Potsdam):  
**Back-of-Device Interaction Allows Creating Very Small Touch Devices**

**26.01.2009**

**Jörn Behrens**

(Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven):  
**Mathematische Modellierung für das deutsch-indonesische Tsunami-Frühwarnsystem**

**09.02.2009**

**Tamar Schlick**

(Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, USA):  
**Enhanced sampling methods for biomolecules: an overview**

**23.03.2009**

**Mirela Ben-Chen**

(Technion – Israel Institute of Technology, Haifa, Israel):  
**Variational Harmonic Maps for Space Deformation**

**18.05.2009**

**Leif Kobbelt**

(RWTH Aachen):  
**Computer Graphics as Applied Basic Research**

**30.06.2009**

**Alfred K. Louis**

(Universität des Saarlandes):  
**Feature Rekonstruktion in der Tomographie**

**23.07.2009**

**Dan Steffy**

(Georgia Institute of Technology, School of Industrial and Systems Engineering, Atlanta, USA):  
**Solving Exact IPs and LPs: problems, questions, and implementations**

**21.09.2009**

**Chandrajit Bajaj**

(Center for Computational Visualization, University of Texas at Austin, USA):  
**Structure Elucidation and Visualization from 3D Electron Microscopy**

**23.09.2009**

**Tony Brewer**

(Conway Computer Corporation):  
**The new era of hybrid-core computing: the architecture of the CONVEY HC-1.**

**19.10.2009**

**Christian Gasser**

(KTH Solid Mechanics, Stockholm, Schweden):  
**Anisotropic constitutive modeling of soft biological tissues based on finite deformation continuum mechanics**

**GASTAUFENTHALTE****Volkard Linke**

(Berlin)  
**01.01.–31.12.2009**

**Andreas Günther**

(Universität Hamburg)  
**05.01.2009**

**Dan Davidov**

(Hebrew University, Jerusalem, Israel)  
**07.–12.01.2009**

**Yair Neve-Oz**

(Hebrew University, Jerusalem, Israel)  
**07.–12.01.2009**

**Rudolf Ressel**

(Göttingen)  
**09.01.2009**

**Thomas Hagstrom**

(Southern Methodist University, Dallas, USA)  
**17.–21.01.2009**

**Imbo Sim**

(Universität Basel, Schweiz)  
**18.–21.01.2009**

**Jörn Behrens**

(Alfred-Wegener-Institut, Bremerhaven)  
**26.01.2009**

**Mirela Ben-Chen**

(Technion, Israel Institute of Technology, Haifa)  
**26.01.2009**

**Tamar Schlick**

(New York University, USA)  
**07.–10.02.2009**

**Erik Mucha**

(Dresden)  
**16.02.–03.07.2009**

**Markus Scheinert**

(IfM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften, Kiel)  
**06.03.2009**

**Sebastian Koke**

(Max-Born-Institut, Berlin)  
**15.03.2009**

**Günter Steinmeyer**

(Max-Born-Institut, Berlin)  
**15.03.2009**

**Lothar Nannen**

(Universität Göttingen)  
**17.03.2009**

**Enrico Goldhan**

(Mittweida)  
**23.03.–07.08.2009**

**Renaud Nédélec**

(Marseille, Frankreich)  
**01.04.–31.07.2009**

**Julian Lamberty**

(TU München)  
**06.04.2009**

**Thomas McCormick**

(Sauder School of Business, Vancouver, Kanada)  
**08.04.–10.04.2009**

**Thomas Wolf**

(Brock University, St. Catharines, Ontario, Kanada)  
**25.–30.04.2009**

**Michał Pióro**

(Warsaw University of Technology, Warschau, Polen)  
**03.–05.05.2009**

**Fernando Solano**

(Warsaw University of Technology, Warschau, Polen)  
**05.05.2009**

**Marc Shapiro**

(INRIA Rocquencourt & LIP6, Paris, Frankreich)  
**17.05.–20.05.2009**

**Leif Kobbelt**  
(RWTH Aachen)  
18.05.2009

**Hendrik W. Lenstra**  
(Universiteit Leiden, Niederlande)  
29.05.2009

**Melissa Cederqvist**  
(Wittenberg University, Ohio, USA)  
01.06.–31.07.2009

**Nina Engelhardt**  
(ENS Cachan, Antenne de Bretagne,  
Bruz, Frankreich)  
01.06.–31.07.2009

**Rachel Saylor**  
(Wittenberg University, Ohio, USA)  
01.06.–31.07.2009

**Jesco Humpola**  
(Universität Bonn)  
05.06.2009

**Pat Hanrahan**  
(Stanford University, USA)  
09.–12.06.2009

**Helmut Grubmüller**  
(Max-Planck-Institut für Biophysikalische  
Chemie, Göttingen)  
12.06.2009

**Daniel Steffy**  
(Georgia Institute of Technology,  
Atlanta, USA)  
14.06.–08.08.2009

**Pietro Belotti**  
(Lehigh University, Bethlehem, USA)  
29.06.–12.07.2009

**Michael Hofmeister**  
(Siemens AG, München)  
29.–30.06.2009

**Thomas Liebling**  
(École Polytechnique Fédérale de  
Lausanne, Schweiz)  
29.–30.06.2009

**Alfred Louis**  
(Universität des Saarlandes, Saarbrücken)  
29.–30.06.2009

**Jörg Sack**  
(Carleton University, Ottawa, Kanada)  
29.–30.06.2009

**Ludger Sax**  
(E.ON Gastransport GmbH, Essen)  
29.–30.06.2009

**Jacint Szabo**  
(Eötvös Loránd University, Budapest,  
Ungarn)  
29.06.–03.07.2009

**Christine Woodin**  
(California Institute of Technology,  
Los Angeles, USA)  
01.07.–31.08.2009

**Erika Kovács**  
(Eötvös Loránd University, Budapest,  
Ungarn)  
09.07.–07.08.2009

**Olivia J. Madill**  
(University of Melbourne, Australien)  
31.08.–19.09.2009

**Marike Boer**  
(Animal Breeding and Genomics Centre,  
Lelystad, Niederlande)  
07.09.–11.09.2009

**Henri Woelders**  
(Wageningen University, Niederlande)  
07.–11.09.2009

**Veronica Albanese**  
(La Sapienza Università di Roma, Italien)  
14.09.–31.12.2009

**Christina Burt**  
(ARC Centre of Excellence for Mathematics  
and Statistics, Carlton, Australien)  
20.09.–10.10.2009

**Yao-Ban Chan**  
(ARC Centre of Excellence for Mathematics  
and Statistics, Carlton, Australien)  
20.09.–10.10.2009

**Chandrajit Bajaj**  
(Center for Computational Visualization,  
University of Texas at Austin)  
21.09.2009

**Tobias Schwarz**  
(Berlin)  
21.09.–07.10.2009

**Robert E. Bixby**  
(Rice University, Houston, Texas, USA)  
23.09.–30.09.2009

**Hans D. Mittelmann**  
(Arizona State University, Tempe, USA)  
23.09.–10.10.2009

**Ted Ralphs**  
(Lehigh University, Bethlehem, USA)  
26.09.–30.09.2009

**Chen Zhiming**  
(Chinese Academy of Sciences,  
Peking, China)  
27.09.–29.09.2009

**Amir Sedighi**  
(Teheran, Iran)  
29.09.–31.12.2009

**Yuji Shinano**  
(Tokyo University of Agriculture and  
Technology, Japan)  
01.10.–31.12.2009

**Martin Putermann**  
(UBC Centre for Health Care Management,  
Vancouver, Kanada)  
05.–11.10.2009

**Mark Barrenechea**  
(SGI, Fremont, USA)  
08.10.2009

**Song Li**  
(Stanford University, USA)  
12.10.–31.12.2009

**Thomas Sturm**  
(Departamento de Matematicas,  
Estadística y Computación Universidad  
de Cantabria, Santander, Spanien)  
18.10.–23.10.2009

**Christian Gasser** (KTH Solid Mechanics,  
Stockholm, Schweden)  
19.–20.10.2009

**Thomas Sturm**  
(Universidad de Cantabria,  
Santander, Spanien)  
19.–23.10.2009

**Fatma Kilinc-Karzan**  
(Georgia Institute of Technology,  
Atlanta, USA)  
25.10.–31.10.2009

**Jürgen Christof**  
(Staats- und Universitätsbibliothek  
Hamburg)  
09.11.2009

**Tjark Vredeveld**  
(Maastricht University, Niederlande)  
15.–16.12.2009

**Seif Haridi**  
(Swedish Institute of Computer Science,  
Kista, Schweden)  
16.–17.12.2009

---

**TAGUNGEN UND  
VERANSTALTUNGEN**

---

12.02.2009  
**Kolloquium für Berliner Bibliotheks-  
referendare: „Der KOBV – der regionale  
Bibliotheksverbund in Berlin und  
Brandenburg“**  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

18.02.2009  
**OCLC: WorldCat.org**  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

24.–26.03.2009  
**MRSC: Many-Core and Reconfigurable  
Supercomputing Conference**  
Veranstalter: Thomas Steinke

03.07.2009  
**7. KOBV-Forum**  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

31.08.2009  
**KOBV-Fernleihe – Workshop**  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

09.–10.09.2009  
**D-Grid Scheduler Interoperability  
(DGS) meeting**  
Veranstalter: Mikael Höggqvist

21.09.–09.10.2009  
**Herbstschule**  
Veranstalter: Martin Grötschel,  
Thorsten Koch

21.–22.09.2009  
**Deutsche SGI User Group (DESUG)**  
Veranstalter: Hinnerk Stüben

22.–23.10.2009  
**Arbeitskreis Supercomputing des ZKI**  
Veranstalter: Hubert Busch, Hinnerk Stüben

04.–05.11.2009  
**DGSI meeting**  
Veranstalter: Mikael Höggqvist

23.11.2009  
**HLRN User workshop  
„Intel Nehalem Update“**  
Veranstalter: Wolfgang Baumann

02.–03.12.2009  
**Storage Summit  
(Sun Microsystems GmbH)**  
Veranstalter: Wolfgang Pyszkalski

07.12.2009  
**Workshop Suchmaschinentechnologie  
für Bibliotheken**  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

## SOFTWARE UND SERVICE

FOLGENDE SOFTWARE WURDE IM ZIB ENTWICKELT UND WIRD LIZENSIERT:

### NUMERISCHE ALGORITHMEN

#### CodeLib

CodeLib umfasst Newton, Gauss- und IVP-Codes.

**Ansprechpartner:** Martin Weiser  
(weiser@zib.de)

#### JCMsuite

JCMsuite ist ein kommerziell vertriebenes Softwarepaket zur rigorosen Lösung der Maxwell'schen Gleichungen für optische Anwendungen.

**Ansprechpartner:** Lin Zschiedrich  
(zschiedrich@zib.de)

#### Kardos

Kardos ist ein FE-Paket zur Lösung parabolischer Differenzialgleichungssysteme.

**Ansprechpartner:** Bodo Erdmann  
(erdmann@zib.de)

#### KASKADE 7

KASKADE 7 ist eine flexible C++-Bibliothek zur FE-Lösung partieller Differentialgleichungssysteme.

**Ansprechpartner:** Martin Weiser  
(weiser@zib.de)

#### NewtonLib

NewtonLib beinhaltet Software zu Peter Deufhard „Newton Methods for Nonlinear Problems-Affine Invariance and Adaptive Algorithms“.

**Ansprechpartner:** Martin Weiser  
(weiser@zib.de)

#### ZIBgridfree

ZIBgridfree ist eine Software zur thermodynamischen Simulation von Wirkstoffmolekülen und Wirkstoff-Target Komplexen.

**Ansprechpartner:** Marcus Weber  
(weber@zib.de)

### VISUALISIERUNG

#### Amira

Amira ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Bildanalyse, Geometrie-Rekonstruktion und Datenvisualisierung.

**Ansprechpartner:** Steffen Prohaska  
(prohaska@zib.de), Daniel Baum  
(baum@zib.de)

#### Lenné3D-Player

Lenné3D bezeichnet die am ZIB entwickelten Landschaftsvisualisierungssysteme. Der Lenné3D-Player stellt Szenen realistisch, skizzenhaft oder gemischt dar, bietet Kamerapfade und Videoexport für Offline-Darstellungen.

**Ansprechpartner:** Malte Clasen  
(clasen@zib.de), Steffen Prohaska  
(prohaska@zib.de)

#### Biosphere3D

Biosphere3D ist das Nachfolgesystem zum Lenné3D Player und ermöglicht Vegetationsdarstellung in größeren Szenarien.

**Ansprechpartner:** Malte Clasen  
(clasen@zib.de), Steffen Prohaska  
(prohaska@zib.de)

### OPTIMIERUNG

#### ZIB Optimization Suite

Die ZIB Optimization Suite umfasst die Teilprodukte SCIP, Soplex und Zimpl. Die drei Produkte sind in einem Paket zu erhalten unter zibopt.zib.de, sind aber auch einzeln erhältlich

**SCIP** (Mixed Integer Program Solver)

**SoPlex** (Implementierung des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von linearen Programmen)

**Zimpl** (Programmiersprache, um das math. Modell eines Problems in ein lineares oder gemischt-ganzzahliges Programm zu übersetzen)

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch  
(koch@zib.de)

### MIPLIB 2003

Bei diesem Programm handelt es sich um ein Standard-Test-Set für den Vergleich von MIP-Lösern.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch  
(koch@zib.de)

#### SteinLib Testdata Library

Es handelt sich um eine Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen, die beständig aktualisiert und erweitert wird.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch  
(koch@zib.de)

#### Sndlib –

#### Survivable Network Design Library

Sndlib ist eine Bibliothek von standardisierten Testdatensätzen für die Festnetzplanung.

**Ansprechpartner:** Ralf Borndörfer  
(borndoerfer@zib.de)

#### ttplib –

#### Library for Train Timetabling Problems

Die Zielsetzung von ttplib ist es, mathematische Modelle und Algorithmen für das Fahrplanungssystem im Bahnverkehr evaluieren zu können.

**Ansprechpartner:** Ralf Borndörfer  
(borndoerfer@zib.de), Thomas Schlechte  
(schlechte@zib.de)

#### MCF – Netzwerksimplexalgorithmus

MCF ist einer der schnellsten Implementierungen des Netzwerksimplexalgorithmus, er ist eines der Standardprogramme zum Testen neuer Mikroprozessoren.

**Ansprechpartner:** Andreas Löbel  
(loebel@zib.de)

#### ZIB Traffic Optimization Suite

Die ZIB Traffic Optimization Suite ist eine Sammlung von mathematischen Optimierungstools zur Lösung von Planungsproblemen im Nah-, Bahn, und Luftverkehr. Sie umfasst folgende Tools:

- VS-OPT (Optimierungstool zur Fahrzeugumlaufplanung)
- DS-OPT (Optimierungstool zur Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr)

- IS-OPT (Optimierungstool zur gleichzeitigen Planung von Fahrzeugumläufen und Fahrdiensten im ÖPNV)
  - CS-OPT (Planung des Einsatzes von Flugzeugbesatzungen)
  - TS-OPT (Optimierungstool zur Allokation von Eisenbahnfahrtrassen)
  - Veranstaltungsplaner für die „Lange Nacht der Wissenschaften“
  - DISCNET (Optimierungstool zur Konfiguration und Planung von Kommunikationsnetzen)
- Ansprechpartner:** Ralf Borndörfer  
(borndoerfer@zib.de)

### COMPUTERALGEBRA

#### REDUCE

Es handelt sich um ein Programmsystem für symbolische Mathematik.

**Ansprechpartner:** Winfried Neun  
(neun@zib.de)

### INFORMATIK

#### XtreemFS

XtreemFS ist ein Dateisystem für verteilte IT-Infrastrukturen mit Methoden für einen hohen Datendurchsatz verbesserter Datenverfügbarkeit durch Replikation.

**Ansprechpartner:** Björn Kolbeck  
(kolbeck@zib.de)

#### Scalaris

Scalaris ist ein transaktionaler, verteilter Key/Value-Store auf Basis eines Peer-to-Peer Systems.

**Ansprechpartner:** Florian Schintke  
(schintke@zib.de), Thorsten Schütt  
(schuett@zib.de)

#### GNDMS

GNDMS ist ein flexibles Datenmanagementsystem für den Einsatz im Grid-Computing. Neben einem Workspace-Konzept bietet es einen erweiterbaren Task-basierten Mechanismus zum Bereitstellen und Verteilen von Daten.

**Ansprechpartner:** Stefan Plantikow  
(plantikow@zib.de), Maik Jorra  
(jorra@zib.de)

#### MetaLooper

Meta Looper ist ein Framework, das die Durchführung und Konfiguration von numerischen Simulationen vereinfacht.

**Ansprechpartner:** Artur Andrzejak  
(andrzejak@zib.de)

#### Stellaris

Stellaris ist ein Service für das Management von Metadaten im Grid auf der Basis von RDF.

**Ansprechpartner:** Mikael Höggqvist  
(hoegqvist@zib.de)

#### Theseus

Theseus ist ein Framework zur Erkennung des Faltungstyps von Proteinen.

**Ansprechpartner:** Thomas Steinke  
(steinke@zib.de)

### INFORMATIONSDIENSTE

#### Math-Net-Informationsserver

Unter der Adresse www.math-net.org befindet sich das Portal des Math-Net. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste: Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software angeboten.

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz

#### Informationdienste des eLib-Servers

Auf dem eLib-Server werden verschiedene Informationsdienste angeboten:

**www.math-net.de/links**

(Math-Net-Links)

**http://elib.zib.de/ICM98**

(International Congress of Mathematics)

**http://webdoc.gwdg.de/ICM98**

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz

#### Server der International Mathematics Union (IMU)

Das ZIB betreut technisch und inhaltlich den Web-Server der IMU. Neben allgemeinen Informationen beinhaltet der Server auch die neusten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU sowie den elektronischen Rundbrief.

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz

### KOBV-DIENSTE

Der KOBV betreibt Informationsdienste für Bibliothekarische Angebote im Internet mit Schwerpunkt auf Berlin und Brandenburg. Darüber hinaus ist der KOBV regionaler Dienstleister für die Bibliotheken.

**www.kobv.de**

(KOBV-Informationsserver)

**http://digibib.kobv.de**

(KOBV-Portal Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg)

**http://digibib.kobv.de/vkfilm**

(Verbundkatalog Film, Literatur, DVD, Videos)

**http://digibib.kobv.de/vkfilm-filme**

(Verbundkatalog DVDs und Videos)

**http://digibib.kobv.de/judaica**

(Verbundkatalog Judaica)

**http://digibib.kobv.de/vknoten**

(Verbundkatalog Noten)

**http://volltexte.kobv.de**

(KOBV-Volltextserver)

**http://bibliotheken.kobv.de**

(Bibliothekenführer)

