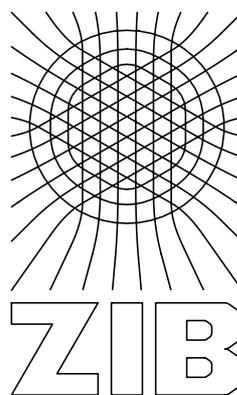

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 2003



VORWORT

Wie in den Vorjahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz *Zuse-Institut Berlin (ZIB)*, auch nach Ablauf des Jahres 2003 allen Freunden und aufmerksamen Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Jahresbericht vor.

Im vergangenen Jahr waren wir erfolgreich tätig in Projekten aus Anwendungsgebieten wie computergestützte Therapie- und Operationsplanung, Entwurf von Medikamenten oder von nanophotonischen Chips, Telekommunikation oder Verkehrsplanung sowie in methodischen Schwerpunkten wie virtuelle Labore, diskrete Strukturen, ganzzahlige Optimierung, Grid und Cluster Computing. Ein Teil unserer Arbeiten ist integriert in das DFG-Forschungszentrum *Mathematik für Schlüsseltechnologien* oder in das *Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB)*. Ein geraffter Überblick über unsere Forschungsaktivitäten findet sich in Kapitel 2.1, genauere Details schließen sich daran an.

Auch unser Dienstleistungssektor hat sich erfolgreich ausgeweitet: Seit Anfang 2003 steht den “Power-Usern” des norddeutschen Raums der *Hochleistungsrechner Nord (HLRN)* im kontingentierte Betrieb zur Verfügung. Von Betriebsbeginn an war die Rechenkapazität gleich dreifach überzeichnet – keine leichte Aufgabe also für den Wissenschaftlichen Ausschuss, der unter der bewährten Leitung von V. Linke (FU Berlin) über eine faire, projektbezogene Vergabe der Rechen- und Speicherplatzkontingente wacht.

Im Berichtszeitraum erzielten wir wiederum erstaunlich hohe *Drittmiteleinahmen* – nach dem auf Sondertatbeständen beruhenden Höhepunkt im letzten Jahr immerhin unser bisher zweitbestes Ergebnis. Es fällt jedoch ins Auge, dass insbesondere der Anteil an Mitteln aus Industrie und Wirtschaft dramatisch weggebrochen ist – in diesen Zeiten leider ein bundesweites Phänomen. Es bleibt jedoch ausdrücklich festzuhalten: nach wie vor werden etwa zwei Drittel unserer Wissenschaftlerstellen aus Drittmitteln finanziert. Auch unsere Rolle als Drittmittelkatalysator für die uns tragenden Universitäten FU, HU, TU und einige außeruniversitäre Forschungseinrichtungen haben wir wieder erfolgreich gespielt – am deutlichsten sichtbar im DFG-Forschungszentrum *Mathematik für Schlüsseltechnologien* und im *BCB*. Neben unserer fachlichen Eingliederung in diese interdisziplinären Verbundprojekte bedeuten diese Aktivitäten gerade für die Leitungsebene des ZIB eine deutliche zeitliche Inanspruchnahme – eine Leistung für die Community, die wir gerne erbringen.

Anfang 2004 ist es uns endlich gelungen, die politisch Verantwortlichen über das ZIB und seine Synergiefunktion zwischen den Universitäten in ausreichendem Detail zu

informieren. Als Konsequenz scheint uns nun wieder eine positive Perspektive offen. Wir bauen darauf, dass wohlmeinenden Worten auch Taten in gleichem Sinne folgen. Der *Wissenschaftliche Beirat* des ZIB tagte am 24./25. Juni 2003. Aus seinem Bericht zitieren wir gerne wörtlich: "Auf den von ihm vertretenen Feldern gelingt es den Arbeitsgruppen, absolutes Weltniveau zu erreichen und zu halten. ... Der Wissenschaftliche Beirat stellt auch in diesem Jahr die großartigen Leistungen des ZIB fest und rät:"

"Kurs halten!"

In der Tat wollen wir unseren Kurs halten, auch in schweren Wassern. Nicht zuletzt aus dem uns zugewachsenen Anteil an Verantwortung für Staat und Gesellschaft.

Berlin, im Mai 2004

A handwritten signature in black ink that reads "Peter Deuffhard". The script is cursive and somewhat stylized, with the first name "Peter" and the last name "Deuffhard" clearly legible.

Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard
Präsident



Das Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin-Dahlem

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Das ZIB — Struktur und Ziele	7
2	Forschung und Entwicklung	12
2.1	Überblick	12
2.2	Schwerpunkte	22
2.2.1	Molekulare Konformationsdynamik	22
2.2.2	Integrierte Optik	34
2.2.3	Computergestützte Therapie- und Operationsplanung	43
2.2.4	Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse	52
2.2.5	Virtuelle Labore	58
2.2.6	Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung	74
2.2.7	Diskrete Strukturen	77
2.2.8	Telekommunikation	89
2.2.9	Ganzzahlige Optimierung	99
2.2.10	Online-Optimierung	105
2.2.11	Verkehr	115
2.2.12	Grid Computing	123
2.2.13	Cluster Computing und Anwendungen	129
2.3	Auszeichnungen und Rufe	135
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	137
3.1	Überblick	137
3.2	Schwerpunkte	140
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	140
3.2.2	Informationssysteme für die Mathematik	144
3.2.3	Math&Industry — Anwendungen der Mathematik im Web . .	146
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	147
3.2.5	REDUCE	149

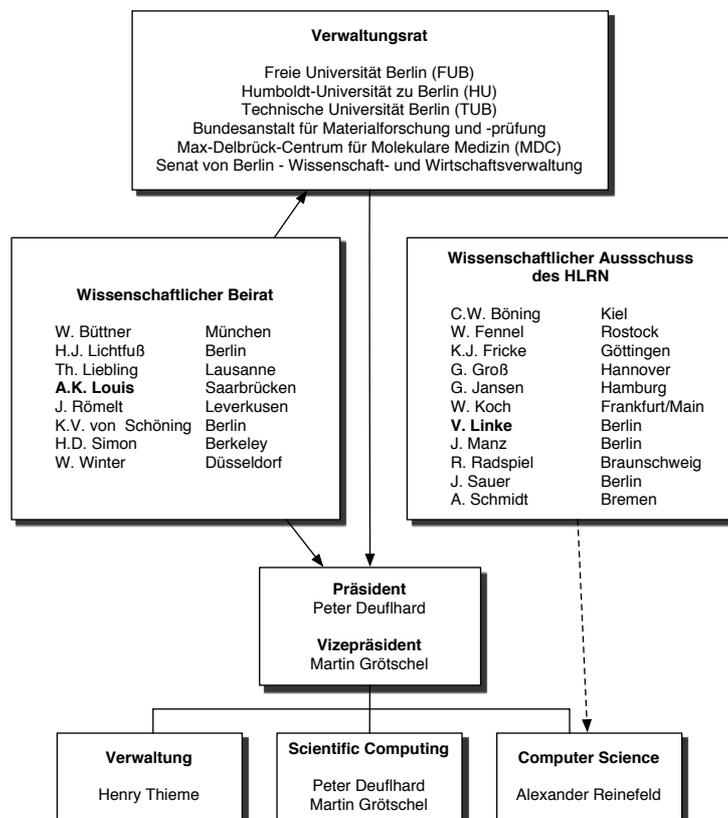
4	Supercomputing und Netze	151
4.1	Hochleistungsrechner am ZIB	151
4.1.1	Hochleistungsrechner Nord (HLRN)	151
4.1.2	Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte	156
4.2	Fachberatung	163
4.2.1	Chemie und Bioinformatik	164
4.2.2	Geowissenschaften	165
4.2.3	Ingenieurwissenschaften	165
4.2.4	Physik	166
4.3	Weitverkehrsnetze	167
4.3.1	Virtueller Supercomputer Berlin - Hannover	167
4.3.2	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	169
5	Publikationen	173
5.1	Preprints	173
5.2	Mitherausgabe von Publikationen	191
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden	192
5.4	Monographien	199
5.5	Dissertationen	200
5.6	Diplomarbeiten	200
6	Software	203
6.1	Numerische Algorithmen	203
6.2	Visualisierung	203
6.3	Optimierung	204
6.4	Computeralgebra	209
6.5	Computer Science	211
6.6	Informationsdienste	214
6.7	KOBV-Dienste	215
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	220
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	220
7.2	Vorlesungen und Seminare	246
7.3	Mitveranstalter auswärtiger Tagungen	250

8	Tagungen und Gäste am ZIB	252
8.1	Gastvorträge	252
8.2	Gastaufenthalte	254
8.3	Tagungen und Veranstaltungen	257
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	258
8.5	Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit	259
9	Organisatorisches	262
9.1	Organe	262
9.2	Satzung	263
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	263
9.4	Mitgliedschaften	263
9.5	ZIB-Fellows	264
9.6	Selbstverwaltung	264
9.7	Wirtschaftliche Situation	265
9.8	Personelle Entwicklung	267
10	Ansprechpartner	269

KAPITEL 1

DAS ZIB – STRUKTUR UND ZIELE

Das Konrad–Zuse–Zentrum für Informationstechnik Berlin ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin. Es betreibt in enger fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik, seit Ende 1998 auch in Praktischer Informatik. Zugleich bietet es Höchstleistungsrechnerkapazität als dazugehörige Dienstleistung an. Das ZIB wurde 1984 durch Gesetz als Anstalt des öffentlichen Rechts gegründet.



Forschung und Entwicklung

Schwerpunkte der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZIB sind die Gebiete *Scientific Computing* und *Computer Science*. Diese Gebiete umfassen

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

Theorie- und Algorithmenentwicklung, die rechentechnische Erprobung der Algorithmen an leistungsfähigen parallelen Computersystemen und der Test der mathematischen Modelle auf ihre praktische Brauchbarkeit sollen dabei eine Synthese eingehen.

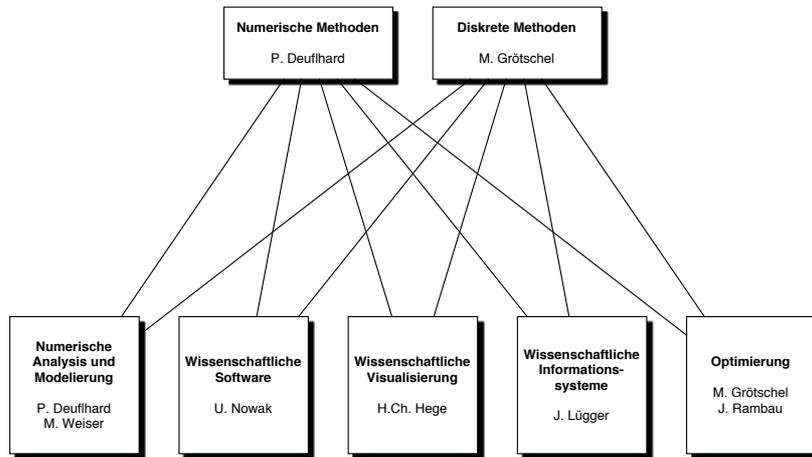
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

Das ZIB leistet Beiträge zur Lösung drängender Fragen in Wissenschaft, Technik, Umwelt oder 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 Höchstleistungsrechnern in enger Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft. Neben Kooperationen mit wissenschaftlichen Einrichtungen betreibt das ZIB zur Zeit gemeinsame Projekte mit Partnern aus den Bereichen Telekommunikation, Medizintechnik, Biotechnologie, Öffentlicher Nahverkehr und Logistik, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energie-Versorgung, Integrierte Optik. Das ZIB ist zudem eine von fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse" tragen.

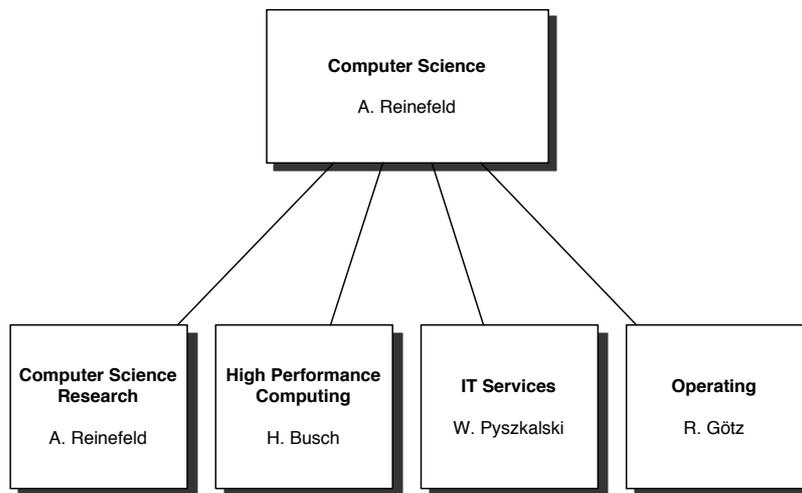
Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer: IBM-System "Series 690" mit jeweils 512 Prozessoren an den HLRN-Standorten Berlin und Hannover) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen im Land Berlin. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus anderen, insbesondere den neuen Bundesländern zur Verfügung. Über die Zuteilung von Rechenzeit an Großprojekte entscheidet ein Zulassungsausschuss. In allen vom Zulassungsausschuss befürworteten Projekten arbeitet mindestens ein Fachberater des ZIB mit.

Bereich Scientific Computing



Bereich Computer Science



Gliederung des Bereiches Scientific Computing

Numerische Methoden

Abteilung Numerische Analysis und Modellierung. Aufgabe 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 Optimal Control) bei komplexen technologischen Problemen. Derzeit behandelte Hauptanwendungsgebiete sind Moleküldynamik, Integrierte Optik und Medizintechnik.

Abteilung Wissenschaftliche Software. Übergreifende Aufgabe ist die Pflege und Weiterentwicklung von numerischer Software, die am ZIB aus Forschungscode hervorgeht. Hauptziel sind effektive Implementierungen und anwenderfreundliche Systeme. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind chemische Verfahrenstechnik, Medizintechnik und Neurobiologie. Die Abteilung betreut die Programmbibliothek CodeLib und berät deren Nutzer. Vorwiegend für Ausbildungszwecke gedacht ist die Entwicklung interaktiver WWW-Labors für numerische Software.

Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung. Aufgabe ist die Entwicklung und Implementierung von neuen Verfahren in den Bereichen wissenschaftliche Visualisierung und biomedizinische Bildverarbeitung. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind medizinische Therapieplanung, computergestützte Chirurgie, Neurobiologie und Moleküldynamik. Die Abteilung stellt Visualisierungs-Software und -Hardware zur Verfügung und unterstützt hausinterne Anwender bei der Realisierung komplexer Visualisierungsprojekte.

Diskrete Methoden

Abteilung Optimierung. Der Schwerpunkt der Forschung liegt in den Bereichen Algorithmische Diskrete Mathematik, Theorie der ganzzahligen Optimierung sowie nichtlineare-, stochastische- und Online-Optimierung. Dabei steht die Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger Optimierungsprobleme im Vordergrund. Ziel ist die mathematische Analyse der hier auftretenden Modelle und — darauf aufbauend — die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren zu ihrer Lösung.

Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme. Aufgaben sind die Konzeption, die Entwicklung und die Realisierung mathematischer Informationssysteme für mathematische Software. Beispielhaft für Internet-basierte Informationstechnologie sind die Projekte “Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)” und “Informationstechnische Werkzeuge für Museen” sowie der “Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)”.

Gliederung des Bereiches Computer Science

Abteilung Computer Science Research. Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich paralleler und verteilter Systeme. Derzeit stehen zwei Arbeitsschwerpunkte im Vordergrund: die Entwicklung von Methoden und Software zur kooperativen Nutzung

geographisch verteilter Systeme für besonders komplexe Anwendungen (Grid Computing) und die Erforschung von Systemsoftware für den Einsatz eng gekoppelter Cluster als dedizierte Parallelrechner.

Abteilung High Performance Computing. Zu den Hauptaufgaben zählt die Auswahl, Bereitstellung und Wartung 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, betreibt das Sekretariat des HLRN und betreut den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN.

Abteilung Operating. Aufgabe ist der Betrieb der Hochleistungsrechnersysteme als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im HLRN. Hinzu kommen statistische Auswertungen der Systemnutzung sowie allgemeine Überwachungsaufgaben.

Abteilung IT Services. Aufgabe ist die Unterstützung der Forschungsarbeiten im ZIB durch Planung, Beschaffung und Wartung der Ausstattung mit Software und Hardware der Informations- und Kommunikationstechnik. Hierzu zählen sämtliche im Hause betriebenen Arbeitsplatzsysteme, Server, Netzkomponenten, Peripheriegeräte, Web- und Mail-Services.

FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG

2.1 Überblick

Zur Orientierung innerhalb der Fülle von Projekten soll hier vorab ein Überblick über die Schwerpunkte unserer Arbeit im Berichtszeitraum gegeben werden. Im nachfolgenden Kapitel 2.2 werden dann die einzelnen Schwerpunkte der Forschung und Entwicklung in den Bereichen *Scientific Computing* und *Computer Science* zusammen mit wenigen herausgehobenen Projekten aufgeführt.

Zunächst werden die Teilbereiche *Numerische Methoden* und *Diskrete Methoden* des Bereichs **Scientific Computing** vorgestellt. Typisch für dieses Gebiet ist eine enge Verflechtung zwischen theoretisch angelegten Grundlagenprojekten, in denen neue Methoden bereitgestellt werden, und auf die Praxis ausgerichteten Anwendungsprojekten.

Der Bereich **Numerische Methoden** des Gebietes Scientific Computing umfasst die Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung*, *Wissenschaftliche Visualisierung* und *Wissenschaftliche Software* – und deckt somit die wesentlichen Aspekte ab, die bei der numerischen Simulation von natur- und ingenieurwissenschaftlichen Problemen eine Rolle spielen. Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

- Konformationsdynamik
- Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung
- Virtuelle Labore

bearbeitet. Aus Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit in den Feldern

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Medizin: Therapie- und Operationsplanung
- Neurobiologie: Virtuelles Gehirn
- Elektrotechnik: Integrierte Optik
- Physik: Gravitationsphysik

Diese untereinander vernetzten Schwerpunkte sollen nun unter Einbeziehung der Drittmittelaktivitäten sowie über das Jahr hinausreichender Perspektiven kurz umrissen werden.

Molekulare Konformationsdynamik. Dieses Thema wird in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Ch. Schütte (FU, Mathematik) im Rahmen einer gemeinsamen Campus-Arbeitsgruppe “Moleküldynamik” bearbeitet, mit der auch ein gemeinsames Campus-Forschungsseminar abgehalten wird. Darüber hinaus bilden Mitglieder der ZIB-Arbeitsgruppe auch Bachelor- und Master-Studierende des *Studienganges Bioinformatik* an der FU aus. Hierzu gehört auch die Durchführung eines einmonatigen Softwarepraktikums sowie die Beteiligung an Vorlesungen und Seminaren.

Zentrales Thema dieses Schwerpunktes ist der Entwurf von Medikamenten auf der mathematischen Basis der *Konformationsanalyse*. Augenfälligste Anerkennung dieses noch relativ jungen wissenschaftlichen Zugangs war der Invited Keynote Talk von P. Deuffhard auf der ICIAM 2003 in Sydney, auf dem auch erste Resultate zu einem vermuteten SARS-Wirkstoff vorgestellt werden konnten. Die schon im Vorjahr begonnene Verbesserung der Perron-Clusteranalyse (PCCA) zu der robusteren Variante PCCA+ wurden im Berichtszeitraum zum Abschluss gebracht: die neue Methode arbeitet im wesentlichen mit dem Konzept der fast-charakteristischen Funktionen, die durch Störung aus exakten charakteristischen Funktionen entstehen und die metastabilen Konformationen mathematisch beschreiben. Interessanterweise treten dabei beschränkte nichtlineare Optimierungsprobleme spezieller Struktur auf. Die Verbesserung der PCCA zu PCCA+ erlaubt nun den automatisierten Einsatz im Virtuellen Screening. Die Verbindung der dort generierten Konformationsensembles von Wirkstoffmolekülen mit Proteinen wird durch eine neuartige Dockingmethode hergestellt, die u.a. auch die Identifikation von aktiven Zentren der Proteine ermöglicht. Dies sind weitere Zwischenschritte auf dem Weg zu einem vollflexiblen Docking (d.h. flexibler Ligand und flexibles Target), das unser eigentliches Ziel ist. Eine mathematische Alternative ist die Entwicklung sogenannter “gitterfreier” Methoden, die im Berichtszeitraum gut vorangekommen ist; sie baut ebenfalls eng auf der PCCA+ auf. Mit Blick auf eine zukünftige Einbeziehung der Quantenmechanik wurden in Zusammenarbeit mit der FU-Arbeitsgruppe Schütte adaptive Partikelmethode entwickelt. Last, but not least, führen die neuen Simulationsmethoden auch in der Visualisierung zu neuen Fragestellungen (virtuelles Moleküllabor), was die visuelle Darstellung der metastabilen Konformationen sowie Strukturvergleiche zwischen Molekülen betrifft.

Ein Teil dieser Arbeiten wurde im Verbundprojekt *Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik* (BCB) durch eine Nachwuchsgruppe (F. Cordes) zum Thema *Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening* vom BMBF gefördert. Arbeiten zum Thema Moleküldynamik gehen auch ein in die Arbeit im DFG-Forschungszentrum “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*” (Teilprojekt A4). Die im Vorjahr avisierte direkte Kooperation mit der Biotech-Firma AnalytiCon Discovery hat sich nicht konkretisiert.

Integrierte Optik. In diesem Schwerpunkt wird die Simulation integriert-optischer Halbleiterkomponenten bis hin zur Signalübertragung auf optischen Glasfasernetzen bearbeitet. Methodische Quelle unserer Aktivitäten ist, nach wie vor, die *Laplace-Domain-Methode* von F. Schmidt (ZIB). Sie gestattet die Konstruktion besonders effizienter neuartiger Algorithmen zu diskreten transparenten Randbedingungen für alle Arten von Wellengleichungen, wobei wir uns vorzugsweise um Elektrodynamik mit Schwerpunkt *Nanophotonik* kümmern. Neben diesen modernen Gebieten bearbeiteten wir auch eher klassische Fragen, wie sie in der Biosensorik auftreten.

Unsere diesbezüglichen Forschungsaktivitäten wurden, bis auf die Stelle von Frank Schmidt, durch Drittmittel finanziert. So sind wir im gegenwärtig laufenden BMBF-Verbundprojekt *HiPhoCs* mit zwei Projekten zu photonischen Kristallen aktiv, bei denen das Design neuartiger industrierelevanter optischer Komponenten im Vordergrund steht. Zwei weitere Projekte im DFG-Forschungszentrum "*Mathematik für Schlüsseltechnologien*" (Teilprojekt D9) entwickeln neue algorithmische Konzepte, um effektivere Löser insbesondere für optische Wellen in periodischen Medien z.B. (photonische Kristalle) bereitzustellen. Eine Reihe weiterer Projektanträge, welche die technologische Anwendung der neuen mathematischen Methoden zum Ziel haben, wurden im Berichtszeitraum beim BMBF in Form von Verbundanträgen mit der Industrie und bei der DFG eingereicht.

Zu dieser Thematik fand eine Vorlesung "*Computational Photonics*" an der FU statt; darüber hinaus wurden zwei Diplomarbeiten und eine Dissertation betreut. Des Weiteren veranstalteten wir ein überregionales Seminar *Photonische Kristalle - Modellierung, Simulation und Technologie*.

Die Spin-off-Firma *JCMwave* hat 2003 erhebliche Anstrengungen unternommen, um in dem hochspezialisierten Markt für Designsoftware optischer Komponenten Fuß zu fassen. Ein unabhängiger Vergleich kommerzieller Simulationssoftware für optische Biosensoren zeigte erst kürzlich wieder unsere fachlich herausragende Positionierung. Insbesondere der Vergleich mit den Resultaten einer Spin-Off Firma des MIT fiel extrem zu unseren Gunsten aus.

Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung. Schon vor einiger Zeit wurden am ZIB neuartige adaptive Multilevel-Methoden zur Behandlung von Problemen der optimalen Steuerung entwickelt, die funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden (M. Weiser, P. Deuffhard), zunächst bei gewöhnlichen Differentialgleichungen. Im Berichtszeitraum wurden die diesbezüglichen Arbeiten insbesondere in Richtung auf partielle Differentialgleichungen ausgedehnt; diese Thematik wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums "*Mathematik für Schlüsseltechnologien*" (Teilprojekt A1) in Kooperation mit F. Tröltzsch (TU, Mathematik) bearbeitet. Erste theoretische Untersuchungen auf Basis affininvarianter Konvergenztheoreme für Fortsetzungsmethoden zum zentralen Pfad wurden begonnen. Eine erste Anwendung fanden die neuen Ideen in der Hyperthermieplanung, wo sie eine strikte Einhaltung der Temperaturbeschränkungen erzwingen und somit das Auftreten von "hot spots" verhindern. Gleichzeitig

ermöglichen sie eine flexible und angemessenere Formulierung des Zielfunktionalen sowie die simultane Behandlung nichtlinearer Effekte des Wärmetransports.

Computergestützte Therapie- und Operationsplanung. Im Mittelpunkt stand, wie in den letzten Jahren, die Weiterentwicklung unseres 3D-Systems zur Planung von knochen- und weichgewebeverlagernden Eingriffen in der Mund-Kiefer-Gesichts-Chirurgie (MKG). Inzwischen kooperieren wir eng mit klinischen Partnern in Basel, München, Leipzig, Erlangen und Stockholm. Die Verbesserungen des Systems wurde anhand von nunmehr 15 klinischen Patienten vorangetrieben, mit durchaus unterschiedlichen Fragestellungen. Eine Dissertation zu einem vereinfachten Muskelmodell als Basis für Mimiksimulationen wurde abgeschlossen.

Auch unsere Kooperation im Rahmen der Klinischen DFG-Forschergruppe *Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese* (Charité, Berlin) zeitigte erste Erfolge; dort stand zunächst die Tibia (Schienbein) im Mittelpunkt des Interesses. Unsere mathematische Analyse gebräuchlicher Ausgleichsmethoden in dieser biomedizinischen Community ergab allerdings ein nicht sehr schmeichelhaftes Bild – was zu interdisziplinären Publikationskämpfen mit Gutachtern geführt hat.

In Fortsetzung von Arbeiten im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*” (Teilprojekt A1) wurde ein mikrovaskuläres Modell der Thermoregulation im Gefäßsystem auf physikalisch sinnvollere Porositätsbedingungen erweitert. Diese Arbeiten haben sich aus unserer langjährigen Kooperation zum Thema Hyperthermie in natürlicher Weise ergeben. Ebenfalls in diesen Zusammenhang gehört die mathematische Behandlung inverser Probleme, speziell die Identifizierung von Temperatur und Perfusion aus MR-Daten; ein dazu beantragtes Einzelprojekt gemeinsam mit unserem klinischen Partner P. Wust (Charité, Campus Virchow) wurde im Januar 2004 bewilligt, wobei die Stelle direkt in der Klinik angesiedelt ist. Darüber hinaus haben sich noch zahlreiche weitere Kooperationsprojekte entwickelt.

Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse. Im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*” (Teilprojekt F2) wurden neue Resultate zur modellbasierten Bildsegmentierung erzielt. Ein grundlegendes Problem hierbei ist der Formvergleich, für den eine bijektive Korrespondenzfunktion zwischen jeweils zwei Formen gefunden werden muss. Die grundlegenden Überlegungen zu einem Vergleichsfunktional, basierend auf metrischen Größen und Krümmung, sind weiter gediehen und ein Spezialfall (auf Basis des konformen Anteils der Metriken der Mannigfaltigkeiten) wurde algorithmisch umgesetzt. Hiermit konnten für die Segmentierung der Leber und des topologisch komplexeren Beckenknochens in CT-Daten bereits erste gute Resultate erzielt werden.

Zur 3D-Rekonstruktion von Geometrien aus Bilddaten wurden neue Verfahren für Teilschritte entwickelt, wie etwa zur Alignierung von sehr großen Bildstapeln – ohne Verlust an Interaktivität. Für die Bildregistrierung wurde in Amira ein allgemeiner Rahmen geschaffen, der die starre, affine und nicht-affine Registrierung umfasst.

Weiterhin wurden neue Methoden zur Analyse der Knochenfeinstruktur aus Micro-CT-Daten entwickelt, sowie zur Rekonstruktion von kapillaren Gefäßnetzwerken aus konfokalen Daten.

Virtuelle Labore. Im *Virtuellen Molekül-Labor* können nun Strukturvergleiche von (kleinen) Molekülen unter Berücksichtigung ihrer metastabilen Konformationen durchgeführt werden. Hierzu wurde eine neue Variante eines Cliques-Erkennungsalgorithmus in attribuierten Graphen entwickelt. Ein Verfahren zur Visualisierung von Konformationen wurde so modifiziert, dass es von den neuen Resultaten der robusten Perron-Cluster-Analyse Gebrauch machen kann. Spezielle Visualisierungstechniken erlauben eine Beurteilung der Qualität von Clusterungen. Mit der Entwicklung von Clusteralgorithmen zur Analyse multimodaler Verteilungen auf dem N -Torus (N Torsionswinkel) wurde begonnen.

Bei der Weiterentwicklung des *Virtuellen Astrophysik-Labors* lag der Schwerpunkt auf Verfahren zur Darstellung von skalaren und vektoriellen Feldern auf hierarchischen, lokal verfeinerten Gittern sowie auf Visualisierungstechniken für tensorielle Felder. Obwohl letztere zur Darstellung von Raumzeit-Metriken in der Allgemeinen Relativitätstheorie entwickelt wurden, ergab sich als Spin-off auch eine Visualisierungsmethode für Diffusionstensor-Daten in der Medizin (MR-DTI).

Die methodischen Entwicklungen für das *Virtuelle Neurolabor* wurden gemeinsam von den Abteilungen Wissenschaftliche Visualisierung und Wissenschaftliche Software vorangetrieben. Einerseits wurden die elastischen Registrationsmethoden zur Einpassung von Individualdaten in anatomische Atlanten verbessert; andererseits wurden numerische Verfahren entwickelt, die eine Simulation von funktionellen Neuronenmodellen (Hodgkin-Huxley-Typ) auf Basis der geometrischen Daten rekonstruierter Neuronen und den zugehörigen elektrophysiologischen Parametern erlauben. Die Methoden wurden in verschiedenen biologischen Fragestellungen erfolgreich angewendet.

Für das *Virtuelle Strömungslabor* wurden neue Verfahren zur Merkmalsextraktion entwickelt. Der Schwerpunkt lag auf der Entwicklung von Werkzeugen zur topologischen Analyse. Ein neues Verfahren erlaubt die Berechnung von Sattelkonnektoren, d.h. ausgezeichneten Stromlinien, die Sattelpunkte der Strömung verbinden. Allgemein werden mit unseren Methoden "topologische Skelette" extrahiert, die strukturelle Einsicht in komplexe 3D-Strömungsfelder liefern. Die Arbeiten stellen Vorarbeiten für ein neu beantragtes Teilprojekt im Sfb 557 "Beeinflussung komplexer turbulenter Schwerströmungen" dar, der 2004 zur Verlängerung ansteht.

Gemeinsame Basis für die virtuellen Labore bildet unsere Software Amira, die auf breiter Front weiter entwickelt wurde. Das Standardsystem enthält jetzt Module zur affinen Registrierung, zur Erstellung und Abspielung von Stereofilmen und unterstützt die neuen 64-Bit-Systeme auf Basis von Itanium2- und Opteron-Prozessoren. Einen Meilenstein stellt die Cluster-Version von AmiraVR dar, die unter anderem im CAVE des DFG-Forschungszentrums "*Mathematik für Schlüsseltechnologien*" zum Einsatz

kommt.

Der Bereich **Diskrete Methoden** setzt sich aus den Abteilungen *Optimierung* und *Wissenschaftliche Informationssysteme* zusammen. Im Folgenden betrachten wir schwerpunktmäßig die Abteilung *Optimierung*; eine Beschreibung der Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* findet sich in Kapitel 3.

Die Aktivitäten der Abteilung *Optimierung* reichen von der mathematischen Modellierung realer Prozesse, über die theoretische Grundlagenforschung und die algorithmische Umsetzung der Theorie, bis hin zum Transfer in die Praxis. Der abteilungsübergreifende Schwerpunkt „Nichtlineare Optimierung und Steuerung“ legt den Grundstein für eine weitergehende Ausnutzung von Synergien im Hause.

Wie in den vergangenen Jahren legten wir besonderen Wert auf die Verflechtung von Theorie und Praxis. Dabei inspirierten konkrete praktische Probleme häufig neue theoretische Fragestellungen. Umgekehrt erlaubten neugewonnene theoretische Erkenntnisse und deren algorithmische Implementierung die Lösung von Anwendungsproblemen neuer Dimensionen. Der Erfolg dieses Konzepts wird u.a. dokumentiert durch zahlreiche Drittmittelförderungen (von Seiten des BMBF, der DFG, der EU, des DFN und vieler Industriefirmen) und Auszeichnungen für Mitarbeiter der Abteilung (vgl. Kapitel 2.3).

Die prominenteste Bestätigung der Forschungsausrichtung ist jedoch die Einrichtung des DFG-Forschungszentrums „*Mathematik für Schlüsseltechnologien*“ an der Technischen Universität Berlin, betrieben von den drei großen Berliner Universitäten, dem Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin. Die Abteilung *Optimierung* leistet mit fünf Gründungs-Teilprojekten seit Mitte 2002 einen substantiellen Beitrag in Telekommunikation, Verkehr und Produktion; alle Teilprojekte durchliefen inzwischen erfolgreich eine erste interne Beurteilung der Antragsteller.

Die Aktivitäten des gesamten Bereichs Diskrete Methoden im Berichtszeitraum 2003 gliedern sich in folgende Schwerpunkte:

Optimierung

- Diskrete Strukturen
- Nichtlineare Optimierung und Steuerung
- Telekommunikation
- Ganzzahlige Optimierung
- Online-Optimierung
- Verkehr

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen
- Math&Industry

Im Folgenden geben wir einen kurzen Überblick zu den einzelnen Themen. Für ausführliche Beschreibungen der Projekte verweisen wir auf die nachfolgenden Abschnitte. Eine Einführung in die Aktivitäten der Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* findet sich in Kapitel 3.

Diskrete Strukturen. Der große Erfolg der kombinatorischen Optimierung bei der Lösung vieler drängender Probleme des täglichen Lebens ist eng mit den Fortschritten in der Erforschung der zugrundeliegenden diskreten Strukturen verbunden. Unsere von der Volkswagen-Stiftung geförderten Aktivitäten, diskrete Mathematik für die Lehrpläne der weiterführenden Schulen attraktiv zu machen, sind so erfolgreich angelaufen, dass der Vorstand des DFG-Forschungszentrums „*Mathematik für Schlüsseltechnologien*“ beschlossen hat, dieses Projekt mit dem Forschungszentrum zu assoziieren. Nach wie vor beschäftigen uns Grapheneigenschaften wie Perfektheit und Baumweite; diese Eigenschaften stehen in engem Zusammenhang mit der effizienten Lösbarkeit wichtiger Optimierungsprobleme. So sind z.B. Frequenzplanungsprobleme mithilfe von Baumzerlegungen beschränkter Weite der unterliegenden Graphen – entgegen früheren Vermutungen – auch in der Praxis oft einfacher zu lösen. Triangulierungen – oder allgemeiner: polyedrische Unterteilungen – spielen eine gewichtige Rolle in Topologie und Geometrie und haben sich zu selbständigen Forschungsgebieten der diskreten Geometrie entwickelt. In den Projekten zu polyedrischen Unterteilungen von Punktfigurationen und triangulierten Mannigfaltigkeiten wurden entsprechende Software-Pakete weiterentwickelt und zwei Buchprojekte – „*Triangulated Manifolds*“ sowie „*Triangulations of Point Sets*“ – fortgeführt.

Nichtlineare Optimierung und Steuerung. In diesem gemeinsamen Schwerpunkt mit der ZIB-Abteilung „*Numerische Analysis und Modellierung*“ werden nichtlineare Modelle zur Optimalsteuerung und zur stochastischen Optimierung zum Einsatz gebracht. Sowohl die Optimierung der Antennensteuerung in der Hyperthermiebehandlung krebserkrankter Patienten als auch die Optimierung der Lastverteilung in Gas- und Wassernetzen erfordern per se nichtlineare Modelle. Für dynamische Portfolio-Optimierung sowie die Steuerung chemischer Prozesse unter unsicheren Daten erzwingt die Stochastik Nichtlinearitäten im Optimierungsmodell. In allen Fällen besteht eine besondere Herausforderung in der Entwicklung adäquater theoretischer und algorithmischer Ansätze für sehr große Modelle, die nach Diskretisierung auf Gittern bzw. Szenariobäumen entstehen. Dass die Methoden in der Praxis tragfähig sind, beweist die bevorstehende Inbetriebnahme eines nichtlinearen Optimierungsverfahrens für die Berliner Wasserbetriebe in Zusammenarbeit mit der Firma ABB Utilities GmbH (Mannheim).

Telekommunikation. Die Telekommunikationsindustrie steht unter einem enormen Druck: UMTS muss ein Erfolg werden, und optische Netze sollen neuen Echtzeit-Diensten mehr Bandbreite und weniger Verzögerung beschieren. Ob nun UMTS oder transparente optische Netze: immer stellt sich für den Planer die Frage, wie ein „gutes“ Netz aussehen soll. Diese Frage stellen wir auch in zwei DFG-Zentrums-Projekten zur integrierten Konfiguration von Multilevel/Multilayer-Netzen und zur Planung der UMTS-Funkschnittstelle. Letzteres geht über das EU-geförderte, auf Standardisierung von Verfahren konzentrierte MOMENTUM-Projekt hinaus, indem es sich mit mathematischen Optimierungsverfahren für praxisrelevante Problemgrößen beschäftigt. Unsere Projekte zur Performance-Analyse von Prozessoren für Signalisierungsnetze und zur Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-Win) wurden in Zusammenarbeit mit der Atesio GmbH (ZIB-Spin-Off, Berlin), dem Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (Berlin), der E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf) und der Siemens AG (München) weitergeführt. Als Service für die Industrie und Wissenschaft unterhält das ZIB einen Server für Informationen verschiedenster Art zu Frequenzzuweisungsproblemen (FAP-Server). Hier können interessierte Anwender und Entwickler u.a. Benchmark-Datensätze für Frequenzzuweisungsprobleme aus der Praxis abrufen.

Ganzzahlige Optimierung. Unsere Forschung konzentriert sich in diesem Schwerpunkt auf die Entwicklung von generellen Konzepten und Tools, die auf ein beliebiges (ohne spezielle Struktureigenschaften) ganzzahliges Optimierungsproblem anwendbar sind. Die Vorteile dieser Vorgehensweise liegen auf der Hand: Sie führt einerseits zu einem tieferen theoretischen Verständnis der zugrundeliegenden Probleme und erlaubt andererseits den Zugang zu einem größeren Spektrum an Anwendungen. Unsere Algorithmen beruhen in der Regel auf polyedrischen Methoden. Ob und wie man polyedrische Informationen über ein binäres Problem (z.B. stabile Mengen) auf eine entsprechende ganzzahlige Version (z.B. stabile Multimengen) hinüberretten kann, ist Gegenstand eines neuen Grundlagen-Projektes. In Kooperation mit Infineon Technologies AG wird Validation von Chip-Entwürfen mit Methoden ganzzahliger Programmierung angegriffen; die Implementierung basiert auf dem im ZIB entwickelten Framework SCIP zur Integration von Integer Programming und Constraint Programming. Weitere Programm-Projekte wie Zimpl (Modellierungssprache), perPlex (Verifizierer) erzeugen im Zusammenhang mit kommerziellen Software-Produkten wie CPLEX einen erheblichen Mehrwert.

Online-Optimierung. Für viele Problemstellungen aus der Praxis modelliert die klassische Offline-Optimierung die vorliegende Situation nur ungenügend. Die Probleme erfordern Entscheidungen, die unmittelbar und ohne Wissen zukünftiger Ereignisse getroffen werden müssen: Oft sind zu Beginn nicht alle Daten bekannt oder es treten während des Betriebs Störungen auf, die zu einer Reoptimierung zwingen. In diesem Schwerpunkt verfolgen wir das Ziel, praxistaugliche mathematische Modelle für die Optimierung von Online- und Echtzeit-Aufgaben zu entwerfen, diese Modelle mathematisch zu untersuchen und daraus algorithmische Strategien abzuleiten. Zwei

DFG-Zentrumsprojekte im Anwendungsfeld Produktion untersuchen mathematische Strukturen in Online-Optimierungsproblemen, wie sie in der innerbetrieblichen Logistik, z.B. im Hochregallager unseres Partners eCom Logistik in Falkensee bei Berlin auftreten. Einmal sollen Gütegarantien für modulare Echtzeit-Systeme aus Gütegarantien für die Module hergeleitet werden. Ferner entwickeln wir Reoptimierungsalgorithmen unter besonderer Berücksichtigung der Sensitivität des zugrundeliegenden Offline-Optimierungsproblems. Unsere echtzeitfähigen Optimierungsalgorithmen für das Online-Dispatching von ADAC-Pannenhilfsfahrzeugen sind inzwischen von der Firma Intergraph Public Safety nachimplementiert worden und laufen in mehreren ADAC-Hilfzentralen im Pilotbetrieb. In einem ersten Schritt zu einer weiteren Industrie-Kooperation haben wir eine Studie für Hermes Technischer Kundendienst über die Optimierung der Einsatzplanung von Service-Technikern durchgeführt.

Verkehr. Wir leisten in diesem Schwerpunkt einen mathematischen Beitrag zur Optimierung von Verkehrssystemen. Neben unseren Projekten im öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV) und in der Transportlogistik stellt nun strategische Planung von Verkehrsnetzen eine neue Herausforderung dar. Dass ein DFG-Zentrumsprojekt zur strategischen Planung im Öffentlichen Personen-Nahverkehr eingerichtet worden ist, weist auf die zentrale Bedeutung dieser Aufgabe hin. Zu diesem Thema entwickeln wir ferner in einem Projekt zur Trassenbörse Modelle zur effektiven Vergabe von Teilen des Gleisnetzes der Deutschen Bahn und Nutzungszeiten an Anbieter von Bahnfahrten. In der operativen Planung im ÖPNV stellt die nun erstmals komplett mögliche integrierte Umlauf- und Dienstplanung der Stadt Regensburg einen Durchbruch dar. Im Berichtszeitraum sind unsere Verfahren bei weiteren Betrieben in den praktischen Einsatz gelangt (Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben). Unsere Kooperationspartner im ÖPNV-Bereich sind zwei marktführende Softwarehäuser, die IVU GmbH (Berlin) und die Mentz Datenverarbeitung GmbH. Auf der nächsten Transferebene kooperieren wir mit den Verkehrsbetrieben von Berlin (BVG) und Regensburg (RVB), insbesondere mit den Mitarbeitern der operativen Planung, um die mathematischen Ideen bereits in der Entwicklungsphase mit den Erfordernissen der betrieblichen Praxis zu verknüpfen. Im Logistik-Bereich kooperieren wir mit der Fiege eCom, die u.a. die drei Läger der Herlitz PBS AG im Berliner Raum organisiert.

Der Bereich **Computer Science** deckt mit seiner Abteilung *Computer Science Research* ein breites Forschungsspektrum ab, das von systemnahen Cluster-Arbeiten bis zur Konzeption von Grid-Systemen für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Systeme reicht. Das verbindende Element zwischen diesen beiden Themenkomplexen liegt in der effizienten Nutzung der Hardware- und Softwarekomponenten für verteilte Rechenaufgaben. Auf den untersten Schichten aufbauend entwickeln wir höherwertige Dienste, die den effizienten und benutzerfreundlichen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen.

Thematisch und methodisch sind die beiden Forschungsschwerpunkte Grid- und Cluster-Computing eng verwandt, wodurch Synergien genutzt werden können. Der Übergang von den sehr großen Cluster-Systemen – und nur an solchen sind wir inter-

essiert – zu geographisch verteilten Grid-Systemen ist fließend. Auch die theoretischen Grundlagen sind oftmals identisch, so dass manche unserer Arbeiten sowohl dem einen als auch dem anderen Schwerpunkt zugeordnet werden können.

Grid Computing. Im Forschungsschwerpunkt Grid Computing liegt der Fokus auf der Entwicklung von Methoden zum Management geographisch verteilter Ressourcen, also Rechenknoten, Datei- und Archivsystemen, Netzwerken, Visualisierungskomponenten, Softwarepaketen und beliebigen anderen Datenquellen. Unser Ziel ist es, die Ressourcen in einen überregionalen Lastverbund einzubinden, so dass Anwendungen einfach und effizient darauf zugreifen können. Das Gesamtsystem soll sich so verhalten, als wären alle Teilkomponenten direkt am Arbeitsplatz verfügbar. Auf diese Weise werden den Nutzern über die gewohnten Zugriffsmechanismen qualitativ höherwertige Dienste zur Verfügung gestellt und Systembetreiber erzielen eine höhere Auslastung ihrer kostenintensiven Hard- und Software.

Ein wichtiges Teilprojekt der Abteilung ist die zuverlässige, sichere und effiziente Speicherung großer Datenmengen in verteilten Grid-Systemen. Da Speicherknoten im Grid jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine geeignete Datenreplikation mit effizienter Datenplatzierung notwendig. Um dies zu unterstützen, entwickeln wir Methoden für Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Cluster Computing und Anwendungen. In diesem Schwerpunkt beschäftigt sich die Abteilung mit der Einbettung lokaler Cluster-Managementsysteme in übergreifende Grid-Systeme. Lokale Managementsysteme müssen mit einheitlichen Schnittstellen und universellen Adaptern versehen werden, um die Dienste der Grid-Ebene adäquat bedienen zu können. Dies ist eine unserer Hauptaufgaben im EU-Projekt DataGrid. Darüber hinaus erforschen wir Methoden zur kooperativen Reservierung von Ressourcen. Dies ist notwendig, wenn z. B. Simulationsanwendungen zeitgleich auf mehreren Clustern ablaufen sollen oder komplexe Anwendungen während ihrer Ausführung eine garantierte Datenübertragungsbandbreite benötigen.

Komplexe Demonstratoranwendungen für Cluster-Systeme finden sich in der Bioinformatik. Sie ist für uns ein besonders interessanter Anwendungsbereich, da bei der Sequenz- oder Strukturvorhersage umfangreiche Datenmengen verarbeitet werden, was sehr große Anforderungen an Bandbreite und Latenzzeit der Verbindungsnetzwerke (sowohl innerhalb von Clustern als auch im Grid) stellt. Unser Ziel besteht darin, sehr effiziente parallele Algorithmen zur Strukturvorhersage zu entwickeln, die nicht nur schnell rechnen, sondern auch ein ausgewogenes Rechen-/Datentransportverhalten aufweisen und damit auf Cluster-Systemen mit verteiltem Speicher effizient ablaufen.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Molekulare Konformationsdynamik

Robuste Perron-Cluster-Analyse (PCCA+)

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Marcus Weber, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Frank Cordes, Daniel Baum

Kooperationspartner: AG Christof Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik)

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF–Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) “Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening”, DFG–Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A4

Zur Konformationsanalyse eines Moleküls wird durch Anwenden eines Markov-Operators ein Ensemble des Zustandsraums generiert. Der Markov-Operator kann dabei durch eine Galerkin-Diskretisierung in eine stochastische Übergangsmatrix überführt werden, die zur Auffindung metastabiler Konformationen mittels Perron-Cluster-Analyse herangezogen wird. Die Übergangsmatrix kann als ε -gestörte Diagonal-Blockmatrix aufgefasst werden, siehe auch Deuffhard [1].

Die bisherige Version der Perron-Cluster-Analyse (PCCA) von Deuffhard et al. [2] überträgt den Störungsansatz auf die Vorzeichenstruktur bestimmter Eigenvektoren der Übergangsmatrix. Einige Schwierigkeiten sind jedoch mit der PCCA-Methode verknüpft:

- Neben “+” und “-” ist auch das Vorzeichen “0” zu beachten. Da die Komponenten der Eigenvektoren mit einer Größenordnung $O(\varepsilon)$ von dem ungestörten Fall abweichen, taucht dieses Vorzeichen als sogenannte *dirty zero* auf. Die Handhabung der dirty zeros hat in der Praxis oft zu Problemen geführt.
- PCCA ist nicht robust. Kleine Änderungen der Übergangsmatrix können zu unterschiedlichen Clusterungen führen. Das liegt an der strikten $\{0, 1\}$ -Zuweisung der Diskretisierungsboxen zu den Konformationen des Moleküls.

Weber und Galliat ersetzen bereits die strikte $\{0, 1\}$ -Zuordnung durch eine Clusterung mit Hilfe von fast-charakteristischen Funktionen. Diese Form der k -Clusterung kann als Abbildung der Daten auf ein $(k - 1)$ -dimensionales Simplex aufgefasst werden. Da die Eingabedaten, d.h. die Komponenten der Eigenvektoren der Übergangsmatrix, die zu den Eigenwerten des Perronclusters gehören, bereits nahezu Simplexgestalt besitzen, ist diese Abbildung linear. Bei der inneren Simplexmethode von Weber [7] zur Bestimmung der linearen Abbildung können sich bei der Konstruktion von Zugehörigkeitsfunktionen negative Zugehörigkeitswerte ergeben. Dieses tritt immer dann ein, wenn das Klassifizierungsproblem im Sinne der fast-charakteristischen Funktionen keine eindeutige Lösung besitzt bzw. eine bestimmte Maximalitätsbedingung verletzt ist, siehe auch Theorem 2.1 in [4].

Daher wurde der Klassifizierungsalgorithmus von Deuffhard und Weber [4] weiterentwickelt. In der sogenannten Robusten Perron Cluster Analyse (PCCA+) wird dabei die Maximalitätsbedingung zugunsten der Einführung einer zu maximierenden *Zielfunktion* aufgegeben. Die Positivität der Zugehörigkeitsfunktionen und die Zerlegung der Einsfunktion wird durch die Einführung von Nebenbedingungen garantiert.

In [4] wurden zwei Zielfunktionen untersucht. Die eine Zielfunktion versucht möglichst hohe Zugehörigkeitswerte zu erzeugen, die andere maximiert die Metastabilität der Konformationen. Beide Zielfunktionen sind homogen in erster Ordnung und erlauben eine Umwandlung des beschränkten Optimierungsproblems mit k^2 Variablen in ein unbeschränktes Optimierungsproblem in $(k - 1)^2$ Variablen. Weiterhin können Lösungen, die im Sinne der Beschränkungen unzulässig sind, durch eine geeignete Skalierung zunächst zulässig gemacht werden und dann als Startwert für das unbeschränkte Optimierungsproblem verwendet werden. Als Startschätzung eignet sich unmittelbar die Lösung der inneren Simplexmethode [7].

Die beiden Schwierigkeiten der PCCA-Methode sind dabei beseitigt, da

- Vorzeichenstrukturen keine Rolle mehr spielen und
- die Zugehörigkeitsfunktionen linear von der Simplexstruktur der Eigenvektoren abhängen, die stetig mit $O(\varepsilon^2)$ gestört wird, siehe Theorem 2.2 in [4].

Übergangswahrscheinlichkeiten und statistische Gewichte lassen sich ähnlich wie bisher berechnen, siehe Deuffhard und Schütte [3].

Der Vorteil der neuen Methode gegenüber dem Vorzeichenalgorithmus hinsichtlich der Robustheit lässt sich auch visualisieren. Bei der Darstellung der Konformationen als Zugehörigkeitsfunktionen mit Hilfe des *volume rendering* werden die Gewichte der einzelnen Molekülzustände dabei aus den Zugehörigkeitsfunktionen ermittelt, siehe Abbildung 2.1. In dem angegebenen Beispiel aus [4] wurde eine Konformationsanalyse mit dem HIV-Protease-Inhibitor VX-478 bei 900K durchgeführt. Die grafische Darstellung der Ergebnisse als Simplizes in $2D$, siehe Abbildung 2.2, kann für $k = 2$ (das Simplex ist eine Strecke) und $k = 3$ (das Simplex ist ein Dreieck) realisiert werden (zu $k > 3$ siehe Seite 29).

Deutlich sieht man, dass bei $k = 2$ mehr als zwei verdichtete Regionen von Daten zu finden sind. Das erlaubt die Annahme, dass es sich in diesem Fall mindestens um 3 Konformationen handelt. Die Kopplungsmatrix bei $k = 4$ (das entsprechende Simplex ist ein Tetraeder und kann in $2D$ nicht mehr dargestellt werden) weist eine Konformation auf, die nur eine Bleibewahrscheinlichkeit von 25% besitzt, so dass man diese nicht mehr als metastabil bezeichnen kann. Diese beiden Beobachtungen legen nahe, dass es sich bei VX-478 um drei Konformationen handelt, die entsprechende Kopplungsmatrix zeigt, dass die Konformationen eine Bleibewahrscheinlichkeit von 95%, 93% bzw. 74% besitzen.



ABBILDUNG 2.1: Konformation des HIV-Protease-Inhibitors VX-478 (900K). *Links*: $\{0, 1\}$ -Zuordnung der Konformationen. Bei dieser nicht robusten Zuordnung können “Fehler” auftreten, die sich in der grafischen Darstellung als zusätzliche kleine Wolken zeigen. *Rechts*: Neue Gewichtung aus der entsprechenden Zugehörigkeitsfunktion. Übergangsregionen haben in allen Konformationen ein *kleines* Gewicht. “Zuordnungsfehler” verschwinden in dieser Darstellung.

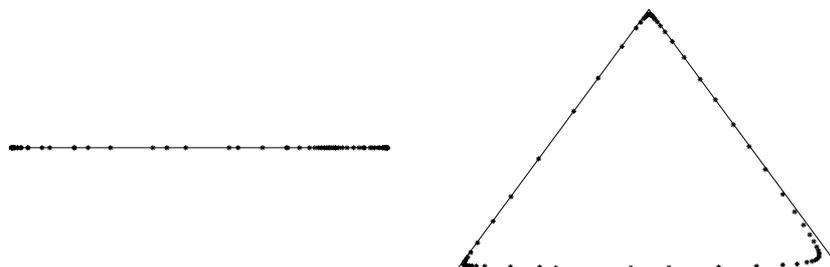


ABBILDUNG 2.2: HIV-Protease-Inhibitor VX-478, Konformationsanalyse bei 900K. k -Clustering kann als Abbildung auf ein $(k - 1)$ -dimensionales Simplex aufgefasst werden. *Links*: Im Fall $k = 2$ ergibt sich eine Strecke. *Rechts*: Im Fall $k = 3$ ergibt sich ein gleichseitiges Dreieck.

Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening

Bearbeitet von: Frank Cordes, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Alexander Steidinger, Andreas May, Steffen Eisenhardt, Sebastian Moll, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Nachwuchsgruppe T. Steinke (BCB/ZIB) “Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern”, Nachwuchsgruppe R. Preissner (BCB/Charité) “3-D strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement”

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) “Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening”, AnalytiCon Discovery GmbH, Potsdam

Die Ansätze eines Protein-Liganden Docking sind im letzten Jahr weiterentwickelt

worden. Der Docking Prozess läuft dabei in drei Stufen ab, die ersten beiden basieren auf einer starren Körperdynamik, die letzte beinhaltet eine vollflexible Minimierung des vorhergesagten Komplexes [11].

In der ersten Stufe wird der Ligand in die aktive Tasche vorpositioniert. Punkte hoher Bindungsaffinität des Targetproteins bilden die Pharmasite, der Ligand wird auf seine pharmazeutisch relevanten Atome reduziert. Einer Superposition beider Punktemengen, modelliert durch anziehende Kräfte zwischen gleichen Pharmagruppen, ermöglicht die Identifikation des aktiven Zentrums in bisher allen 20 Testfällen. Im zweiten Schritt des Dockings folgt ein Kraftfeld basiertes Finetuning, welches aus den nicht kovalenten Wechselwirkungen zwischen Protein und Ligand die Position und Orientierung des Liganden optimiert. Durch eine Minimierung der potentiellen Energie des gesamten Komplexes in der dritten Stufe des Dockings wird eine Relaxation aller Freiheitsgrade bewirkt.

Der Moleküldatensatz CCDC/Astex Test Set wurde auf dem Linux-Cluster der BCB-Nachwuchsgruppen des ZIB gegen die C-Scr Tyrosin Kinase(1A07) gescreent. 60% der 297 Liganden konnten im aktiven Zentrum des Targets mit einer negativen Wechselwirkungsenergie platziert werden. Die aktive Form des nativen Liganden zeichnet sich allerdings nicht durch die beste Wechselwirkungsenergie aus.

Das Ergebnis des Screenings macht deutlich, dass die Bewertung von gedockten Protein-Liganden-Komplexen weitere, im bisherigen Ansatz vernachlässigte Energieterme erfordert. Zur Verbesserung des sogenannten Scorings wurde deshalb ein Modell für einen zusätzlichen Solvatisierungsterm entwickelt. Basis der Berechnung bildet die molekulare Grenzfläche der Moleküle. Auf dieser werden proportional zur Feldstärke Polarisationsladungen platziert über deren Wechselwirkungsenergie mit den atomaren Partiaalladungen sich der elektrostatische Anteil annähern lässt. Ein entropischer Term kann durch sogenannte Atomic Solvation Parameter charakterisiert werden. Die Modellierung wurde mit 213 kleinen Molekülen mit experimentell bekannter freier Solvatisierungsenthalpie parameterisiert, wobei ein Korrelationskoeffizient zwischen Modell und Experiment von 0.95 gefunden wurde. Der Einsatz der Scoringfunktion zur Bewertung der Screeningergebnisse steht noch aus.

Das bisherige Schema des Screenings geht davon aus, dass die bindenden Konformere des Protein-Ligand Komplexes bekannt sind. Tatsächlich sind die beteiligten Moleküle hoch flexibel, so dass allenfalls metastabile Konformationsmengen identifiziert werden können. Eine Bachelor-Arbeit wurde zu diesem Thema am Modellsystem der pharmazeutisch interessanten Bicyclononane durchgeführt [20]. Es konnte gezeigt werden, dass die berechneten metastabilen Konformationen von 18 verschiedenen Derivaten qualitativ mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen. Quantitative Validierungen sind im bisherigen Stand des Projektes noch nicht möglich.

Die Verwendung der Konformationsdaten für das Docking beruht auf zwei Strategien. Die erste beinhaltet die Selektion von repräsentativen Konformationen aus der Gesamtheit des Konformationsraums, welche anschließend als starre Liganden gegen das Target gedockt werden. Die Auswahl der Konformationen erweist sich hierbei als

schwierig, da die bioaktive Konformation nicht identisch mit der Konformation der geringsten potentiellen Energie ist. Es ist geplant, genetische Algorithmen für die geeignete Auswahl einzusetzen. Der zweite Ansatz versucht das Problem mit Hilfe einer Fragmentierung des Liganden zu lösen.

Gitterfreie Methoden in der Konformationsdynamik

Bearbeitet von: Marcus Weber, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: AG Christof Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik)

Durch die Einführung der robusten Perron-Cluster-Analyse werden Konformationen als fast-charakteristische Zugehörigkeitsfunktionen definiert. Dieses Konzept entspricht dem Übergang von mengen- bzw. gitterbasierten Algorithmen zu funktionsraumbasierten bzw. gitterfreien Methoden. Eine Dissertation zu diesem Thema ist in Vorbereitung [8].

In diesem Sinne wurde die Galerkin-Diskretisierung des Übergangsoperators auf allgemeine nicht-orthogonale Ansatzfunktionen erweitert. Es ergibt sich hierbei neben der Übergangsmatrix P noch eine Überlappungsmatrix S , vergleichbar mit einer skalierten *Massenmatrix* in Finite-Elemente-Methoden, die zu einem verallgemeinerten Eigenwertproblem im Perron Cluster Algorithmus führt.

Trifft man die Wahl der Ansatzfunktionen so, dass ähnlich zu den Zugehörigkeitsfunktionen die Partition der Einsfunktion erhalten bleibt, dann sind die Matrizen P und S stochastisch und besitzen jeweils dieselbe invariante Dichte.

Diese Information konnte für einen gitterfreien uncoupling/coupling Ansatz benutzt werden. Bei dieser gitterfreien Methode nutzt man bestimmte, von den Ansatzfunktionen abhängige Modifikationen der Molekülpotentialfunktion, die zu einer Entkopplung des Übergangsoperators führen.

Das Sampling kann damit jeweils auf Teile des Ortsraumes beschränkt werden. Diese Teile sollten einerseits eine geringe Varianz bezüglich der zu berechnenden Übergangs- und Überlappungsintegrale besitzen und somit ein schnelles Mischen der Markov-Ketten bewirken. Andererseits müssen sich die Teilsamplings genügend überlappen, was die Kondition der zu berechnenden Kopplungsgewichte verbessert.

Die Samplingmethode mittels Potentialmodifikation ist ähnlich dem *sukzessiven umbrella sampling* von Virneau et al. [10]. Schwierig ist dabei immer der Kopplungsschritt, der die Kenntnis von Zustandssummen voraussetzt und z.B. bei Virneau et al. aus einem sukzessiven Sampling mit fortlaufender Extrapolation der Kopplungsgewichte besteht. In unserem Ansatz konnte gezeigt werden, dass sich die Kopplungsgewichte durch die Überschneidung der Teilsamplings ergeben, und zwar *eindeutig* als Lösung eines Eigenwertproblems mit einer positiven, stochastischen Matrix M . Außerdem müssen die Samplings deshalb nicht sukzessive ablaufen, sondern können parallel durchgeführt werden.

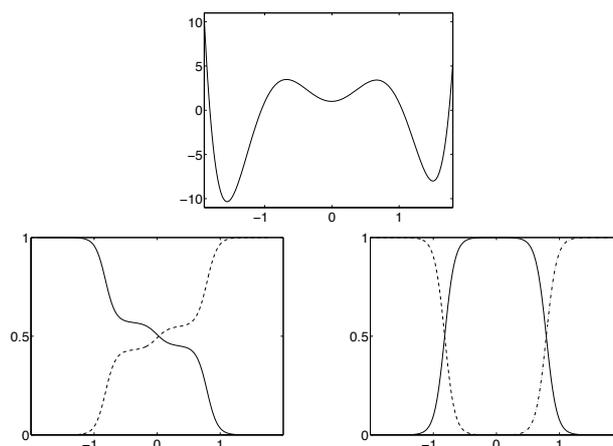


ABBILDUNG 2.3: *Oben:* Zweidimensionales Potential mit hohen Energiebarrieren. Ziel ist es, die “Töpfe” und deren Gewicht zu identifizieren. *Unten:* Gitterfreie Darstellung der Zugehörigkeitsfunktionen. *Links:* Als 2-Clusterproblem mit Übergangsbereich. Durch gitterfreies uncoupling/coupling korrekt berechnete Gewichte der Konformationen: 79% und 21%. *Rechts:* Als 3-Clusterproblem mit einer weniger metastabilen Konformation. Korrekt berechnete Gewichte: 79%, 0.5% und 20.5%.

Die Wahl der Ansatzfunktionen, sollte dabei so gestaltet werden, dass die Drazin-Inverse der Matrix M eine niedrige Konditionszahl aufweist, da diese Zahl die Güte der Kopplungsgewichte bestimmt, siehe Meyer [9]. Derzeit wird untersucht, wie die Drazin-Inverse als Monitor für Basisergänzungsstrategien als auch für hierarchische Methoden einsetzbar ist, um die Wahl der Ansatzfunktionen zu verbessern, siehe auch Liu [5].

Erste Testprobleme in $2D$ und $3D$ sind erfolgreich abgeschlossen worden, siehe Abbildung 2.3.

Virtuelles Moleküllabor

Bearbeitet von: Johannes Schmidt-Ehrenberg, Daniel Baum, Christian Schudoma, Maro Bader

Kooperationspartner: AG Christof Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik), Nachwuchsgruppe (BCB/ZIB) “Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern”, Nachwuchsgruppe (BCB/Charité) “3-D strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement”, AG G. Galizia (FU Berlin, Neurobiologie), Indeed – Visual Concepts GmbH, Berlin

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) “Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening”

STRUKTURVERGLEICH VON MOLEKÜLEN UNTER BERÜCKSICHTIGUNG IHRER

METASTABILEN KONFORMATIONEN. Beim Vergleich pharmazeutisch wirksamer Moleküle versucht man insbesondere ähnliche Teilstrukturen zu identifizieren. Entsprechende Verfahren für kleine Moleküle (20-100 Atome) sind bekannt. Man unterscheidet starre, semi-flexible und flexible Verfahren. Starre Verfahren berücksichtigen nur ein einzelnes Konformer das eine Konformation repräsentiert. Die Verfahren sind sehr schnell, aber nur dann erfolgreich, wenn zufälligerweise die "richtigen" Konformere der Moleküle vorliegen. Flexible Verfahren erlauben Konformationsänderungen der Moleküle während des Vergleichs. Sie liefern gute Resultate, sind aber sehr aufwendig. Eine Kompromisslösung stellen semi-flexible Vergleichsverfahren dar. Sie berücksichtigen die Flexibilität, indem sie pro Molekül eine Menge von ausgewählten Konformeren betrachten.

Das langfristige Ziel ist ein Verfahren, das die Flexibilität der Moleküle möglichst gut berücksichtigt. In einem ersten Schritt wurde ein semi-flexibles Verfahren entwickelt, das bei akzeptablen Laufzeiten pro Molekül viele Konformere berücksichtigen kann. Da sich Konformere in der Regel nur in wenigen Torsionswinkeln unterscheiden, werden zunächst ähnliche Teilstrukturen in den Konformeren eines Moleküls identifiziert. Diese werden dazu genutzt, ein Pseudomolekül aufzubauen, das die Strukturinformation aller Konformere enthält, dabei aber möglichst wenig Atome beinhaltet. Hierfür wird ein vollständiger Graph generiert, in dem jedes Konformer durch einen Knoten repräsentiert ist. Das Gewicht jeder Kante dieses Graphen entspricht der Anzahl nicht überlagerter Atome der beiden Konformere. Von diesem Graphen wird der minimalspannende Baum (MST) berechnet, d.h. ein Baum, der jeden Knoten des Graphen enthält und minimales Kantengewicht hat. Das Pseudomolekül wird nun mit einem Konformer initialisiert, das im MST Endpunkt einer minimalen Kante ist. Anschließend wird der MST traversiert und die Konformere werden in der entsprechenden Reihenfolge zu einem Pseudomolekül überlagert. Ein Atom des Pseudomoleküls repräsentiert das gleiche Atom verschiedener Konformere, sofern es in einer größten gemeinsamen Teilstruktur mindestens zweier Konformere auftritt.

Identische Teilstrukturen (bis auf Spiegelung) haben die Eigenschaft, dass ihre Distanzmatrizen bis auf Permutationen identisch sind und lassen sich daher als Cliques in einem Korrespondenzgraphen [19] finden. Hierfür wurde eine Variante der Cliques-Erkennung für attributierte Graphen entwickelt [12].

Sollen mehrere Moleküle miteinander verglichen werden, wird zunächst ein paarweiser Vergleich der Moleküle mit einem Referenz-Molekül durchgeführt. Anschließend werden die Teilstrukturen identifiziert, die in mehreren Vergleichen gefunden wurden. Auch dies kann mit einer Variante des Clique-Erkennungsalgorithmus geschehen.

Bislang wurden an zwei Molekül-Gruppen Tests durchgeführt: (1) 48 Duftmoleküle, zu denen experimentelle Daten aus der AG G.Galizia vorliegen, (2) die drei Angiotensin-II-Antagonisten Losartan, L-158-809-8 und CV-11974-14. Jeweils eines der besten Matchings für beide Gruppen ist in Abbildung 2.4 zu sehen. Für beide Gruppen wurden gute Ergebnisse erzielt.

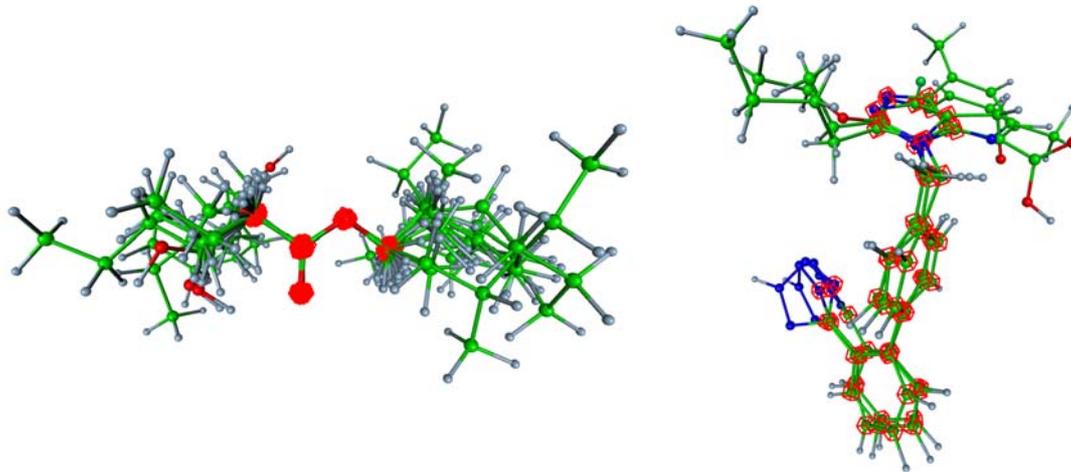


ABBILDUNG 2.4: Ergebnisse des Strukturvergleichs. *Links*: In 19 von 48 Duftmolekülen wurde die (vergrößert dargestellte) Teilstruktur bestehend aus einer Ester-Gruppe und zwei weiteren Kohlenstoff-Atomen gefunden. *Rechts*: Eine Teilstruktur der Größe 20 (erkennbar an den ‘Drahtwürfeln’ um die Atome) wurde in den drei Angiotensin-II-Antagonisten Losartan, L-158-809-8 und CV-11974-14 gefunden.

VISUALISIERUNG GEWICHTETER CLUSTERZUORDNUNGEN. Die robuste Perron-Cluster-Analyse [4] liefert keine eindeutige Zuordnung der Boxen einer Diskretisierung zu Clustern, sondern gibt für jede Box und jeden Cluster eine Zuordnungswahrscheinlichkeit an. Dementsprechend wurde der Algorithmus zur Berechnung von Konfigurationsdichten [18], der bisher von einer eindeutigen Zuordnung der einzelnen Konfigurationen zu Clustern ausging, auf die Berücksichtigung gewichteter Zuordnungen verallgemeinert (Abbildung 2.1).

Um die Qualität der entstandenen Clusterung beurteilen zu können, wurde ein Modul zur Visualisierung der Zuordnungswahrscheinlichkeiten entwickelt. Bei einer Zerlegung der Zustandsmenge in N Cluster sind jeder Box N Gewichte zugeordnet, die ihre Zugehörigkeit zu den Clustern beschreiben. Diese Gewichte können als baryzentrische Koordinaten in einem $(N - 1)$ -Simplex interpretiert werden, dessen Eckpunkte für die eindeutigen Zugehörigkeit zu einem Cluster stehen. Da dieser für $N > 4$ nicht vollständig im dreidimensionalen Raum darstellbar ist, wird eine Projektion auf die 2-Simplexe, also die Dreiecke, durchgeführt, die der Rand des $(N - 1)$ -Simplex enthält.

Jeder der Punkte im Inneren des $(N - 1)$ -Simplex wird auf den ihm nächstliegenden 2-Simplex projiziert. Das bedeutet im Hinblick auf Clusterzuordnungen, dass für jede Box nur das Verhältnis der drei größten Gewichte dargestellt wird, was jedoch für praktische Zwecke ausreicht. Für jede auftretende Kombination von 3 Clustern wird ein Dreieck gezeichnet (Abbildung 2.5), in dem die entsprechenden Boxen als Punkte

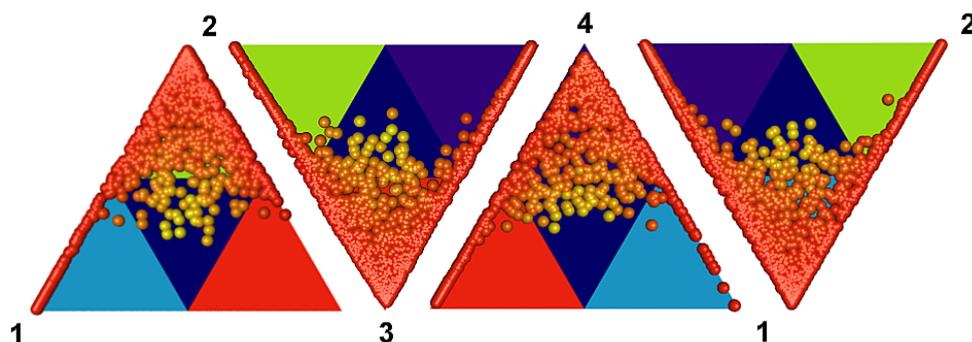


ABBILDUNG 2.5: Darstellung der drei wahrscheinlichsten Zuordnungen der Boxen einer Diskretisierung zu vier Clustern. Jede Kugel entspricht einer Box, jedes Dreieck einer Kombination von drei Clustern. Die vier Cluster sind durch die Ziffern 1 bis 4 der Ecken bezeichnet. In der Darstellung ist zu erkennen, dass die Übergänge $1 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow 3 \leftrightarrow 4 \leftrightarrow 1$ auftreten, $1 \leftrightarrow 3$ und $2 \leftrightarrow 4$ jedoch nicht.

dargestellt werden. Die Lage der Punkte gibt dabei Aufschluss über die Zuordnung der Boxen zu den drei Clustern. Je stärker eine Position zu einer der Ecken tendiert, desto klarer gehört die zugehörige Box zu dem dieser Ecke entsprechenden Cluster.

VISUALISIERUNG MOLEKULARER ZUSTANDSMENGEN. Die robuste Perron-Cluster-Analyse beschreibt eine metastabile Konformation durch die diskrete Approximation einer Wahrscheinlichkeitsdichte im Formenraum des untersuchten Moleküls. Ziel der Visualisierung ist es, aus dieser Dichte abzuleiten, welche typische Form das Molekül in dieser Konformation annimmt und mit welcher Flexibilität es davon abweichen kann. Im Falle einer unimodalen Dichte liegt es nahe, eine mittlere Form zu berechnen. Die typischerweise vorliegenden Dichten sind jedoch multimodal, haben also mehrere Häufungszentren. Diese einzelnen Häufungen müssen zuerst voneinander getrennt werden.

Eine Besonderheit ist die Struktur des zu betrachtenden Raumes. Die Formvariationen eines Moleküls können besonders klar mit Hilfe seiner Torsionswinkel beschrieben werden. Der relevante Teil des Formenraumes hat also die Topologie eines N -Torus, wenn N die Anzahl der Torsionswinkel ist. Daher wurde mit der Entwicklung spezifischer geometrischer Clusteralgorithmen, zur Analyse multimodaler Verteilungen auf auf dem N -Torus begonnen.

SEKUNDÄRSTRUKTUR-ERKENNUNG Die Funktionalität von amiraMol hinsichtlich Protein-Visualisierung wurde erweitert indem die DSSP-Methode [13] zur Sekundärstruktur-Erkennung (mit leichten Modifikationen) implementiert wurde. Damit ist amiraMol nicht mehr auf die in der PDB eingetragenen Sekundärstrukturen angewiesen. Damit verbunden ist auch die Berechnung der Wasserstoff-Brücken-Bindungen, die in amiraMol getrennt visualisiert werden können.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Webbasierte Steuerung von Konformationsberechnungen (Alexander Steidinger, Frank Cordes)

Zum Start und zur Überwachung von Konformationsberechnungen sowie zum Docking von Enzym-Ligand-Komplexen wird ein auf JavaServer Pages basierendes Webinterface verwendet. Zur Benutzerinteraktion wird auf der Klientenseite lediglich ein Webbrowser benötigt. Berechnungen werden vom Webserver Tomcat des Apache-Jakarta-Projektes auf dem Linux-Cluster des BCB gestartet. Die Programmiersprache Java ermöglicht eine kurze Entwicklungszeit, Änderungen an der Webschnittstelle bei laufendem Webserver und detaillierte Information des Benutzers bei Eingabefehlern. Externe Programme können kontrolliert gestartet werden. Zur Unterstützung der Datenaquisition wird das frei verfügbare Datenbanksystem MySQL verwendet, in dem außer Berechnungsparametern auch Metadaten wie Datum und Nutzernamen gespeichert sind. Dadurch können redundante Berechnungen verhindert und das Auffinden bereits durchgeführter Berechnungen erleichtert werden.

In Zukunft ist eine effiziente und verlustarme Speicherung der Berechnungsdaten direkt in der Datenbank anstelle auf dem Dateisystem vorgesehen, damit eine konsistente und sichere Verwaltung der Moleküldaten gewährleistet werden kann.

RNA 3D-Modelling (Alice Boit, Frank Cordes, Christian Schudoma)

Im Berichtszeitraum ist die Diplomarbeit *RNA 3D-Modeling* [14] fertiggestellt worden. Methoden zur Modellierung einer RNA-Struktur bei gegebener Sequenz wurden implementiert oder aus frei verfügbaren Programmen übernommen und mit Hilfe geeigneter Schnittstellen zu einem größeren Programmpaket unter der Visualisierungsebene von AmiraMol zusammengefasst (siehe Abbildung 2.6). Es konnte gezeigt werden, dass bei geeigneter Datenlage in einer Templatebibliothek von t-RNA-Strukturen 3D-Modelle für verschiedenen Anfragesequenzen erstellt werden konnten, die in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten stehen. Sobald die Datenlage der Strukturdatenbanken allerdings abnimmt (z.B. bei Aptameren), sinkt erwartungsgemäß auch die Qualität der modellierten Strukturen [15]. Das erstellte Programmpaket soll als Grundlage für weitere Arbeiten auf dem Gebiet der RNA-Biochemie eingesetzt werden.

RNA-Lego (Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Christian Schudoma, Hans-Christian Hege; Kooperation: Tobias Höllner, Luc Jaeger (University of California, Santa Barbara, USA))

Im Berichtszeitraum wurde mit vorbereitenden Arbeiten für eine Kooperation mit der UCSB im Bereich der RNA-Modellierung unter Einsatz von VR-Technologie begonnen. Ziel der Kooperation ist der Aufbau eines VR-Systems, das die Konstruktion von RNA-Nano-Objekten unterstützt. Ausgangspunkt sind umfangreiche Vorarbeiten von

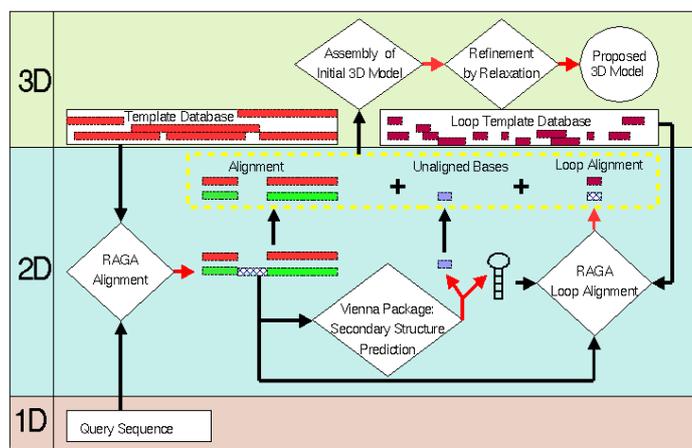


ABBILDUNG 2.6: Algorithmisches Netzwerk der RNA-Modellierung – von der Sequenz (1D) über die Sekundärstruktur (2D) zur Tertiärstruktur (3D).

Luc Jaeger zu RNA-Molekülen, die möglicherweise als Bausteine von Nanomaschinen dienen können. Zunächst sollen die Ergebnisse aus der Diplomarbeit *RNA 3D-Modeling* [14] enger in die Visualisierungsumgebung AmiraMol integriert und mit VR-Interaktionstechniken verknüpft werden.

Adaptive Lösung von Liouville-Gleichungen (Martin Weiser; Kooperation: Illia Horenko (FU Berlin))

Die Attraktivität der quanten-klassischen Liouville-Gleichung zur Beschreibung von quantenchemischen Vorgängen beruht auf der Möglichkeit einer quasi-klassischen Interpretation. Diese Formulierung führt jedoch ähnlich wie die dadurch approximierete Schrödingergleichung zu einer zeitabhängigen partiellen Differentialgleichung in mit der Teilchenzahl wachsender Raumdimension. Gitterbasierte Methoden versagen hier schon für recht kleine Anwendungsbeispiele. Die im vorigen Jahr entwickelte und an der klassischen Liouville-Gleichung demonstrierte Partikelmethode [16] wurde im Berichtszeitraum auf die quanten-klassische Liouville-Gleichung und höhere Raumdimensionen erweitert [17]. Das auf der Rothe-Methode basierende Verfahren zeichnet sich durch vollständige Adaptivität in Ort und Zeit aus. Die Erzeugung und Entfernung einzelner Partikel orientiert sich dabei an einer vom Anwender vorgegebenen Toleranz und der numerischen Stabilität des Verfahrens.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard. A Comparison of Related Concepts in Computational Chemistry and Mathematics. In: *Chemistry and Mathematics: Two Scientific Languages of the 21st Century*. Nova Acta Leopoldina NF Bd. 88, Nr. 330, pp. 51-66 (2003).

-
- [2] P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, und Ch. Schütte. Identification of almost invariant aggregates in reversible nearly uncoupled Markov chains. *Lin. Alg. Appl.*, 315:39–59, 2000.
- [3] P. Deuffhard und Ch. Schütte. Molecular Conformation Dynamics and Computational Drug Design. Report 03–20, ZIB, 2003. Erscheint in: Proc. 5th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2003), Sydney, Australien, 7.-11.07.2003.
- [4] P. Deuffhard und M. Weber. Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics. Report 03–19, ZIB, 2003.
- [5] G. R. Liu. Mesh Free Methods – Moving beyond the Finite Element Method. CRC Press Boca Raton, London, New York, Washington, D.C., 2002.
- [6] Ch. P. Robert und G. Casella. Monte Carlo Statistical Methods. Springer Verlag New York, Berlin, Heidelberg, 1999.
- [7] M. Weber. Improved Perron Cluster Analysis. Report 03–04, ZIB, 2003.
- [8] M. Weber. Meshless Methods in Conformation Dynamics. Vorarbeiten für eine Dissertation.
- [9] C.D. Meyer. The role of the group generalized inverse in the theory of finite Markov chains. *SIAM Rev.*, 17(1974), pp. 443-464.
- [10] P. Virnau und M. Müller. Successive umbrella sampling. Institut für Physik, Universität Mainz, Rep. 0306678v1. Eingereicht beim J. Chem. Phys., Juni 2003.
- [11] A. May, S. Eisenhardt, J. Schmidt-Ehrenberg, F. Cordes. Rigid body docking for Virtual Screening. Report 03–47, ZIB, 2003.
- [12] D. Baum. Finding All Maximal Cliques of a Family of Induced Subgraphs. Report 03–53, ZIB, 2003.
- [13] W. Kabsch und C. Sander. Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features. *Biopolymers* (22), pp. 2577-2637 (1983).
- [14] A. Boit. RNA 3D-Modeling. Diploma Thesis, Institute for Theoretical Biology, Humboldt-Universität zu Berlin, 2003
- [15] A. Boit, F. Cordes. RNA 3D-Modeling. Report 03–48, ZIB, 2003
- [16] I. Horenko, M. Weiser, *Adaptive integration of molecular dynamics*, *J. Comput. Chem.* **24**, 1921-1929, 2003.

- [17] I. Horenko, M. Weiser, B. Schmidt und C. Schütte, Fully Adaptive Propagation of the Quantum-Classical Liouville Equation, erscheint in Journal of Chemical Physics.
- [18] J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum und H.-C. Hege, Visualizing Dynamic Molecular Conformations, Proceedings of IEEE Visualization, S. 235-242, 2002.
- [19] A.T. Brint und P. Willett, Algorithms for the identification of three-dimensional maximal common substructures, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 27, pp. 152–158, 1987.
- [20] S. Moll, Die Berechnung metastabiler Konformationen von Biomolekülen am Beispiel des Bicyclo[3.3.1]nonan, Bachelor-Arbeit, Bioinformatik am FB Mathematik und Informatik der FU Berlin, 2003.

2.2.2 Integrierte Optik

Im Schwerpunkt *Integrierte Optik* haben wir die in den Vorjahren entwickelten Ansätze zur Lösung industrierelevanter Probleme konsequent weiterverfolgt. Durch die gleichzeitige Beteiligung im Bereich “Elektronische Schaltkreise und optische Technologien” des DFG-Forschungszentrums “Mathematik für Schlüsseltechnologien” und am BMBF-Verbundprojekt “Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation” sind wir in der sehr günstigen Lage, gleichzeitig mathematisch-algorithmische Konzepte voranzutreiben und diese unmittelbar an aktuellen technologischen Problemen zu testen. Die dabei entstehenden Synergieeffekte befruchten sowohl die theoretische als auch die anwendungsorientierte Seite unserer Arbeit. Insbesondere im Anwendungsschwerpunkt Photonische Kristalle verwenden unsere Kooperationspartner die von uns entwickelte Software zum Entwurf und zur Optimierung integriert-optischer Komponenten. Des weiteren bietet das ZIB-Spin-Off Unternehmen JCMwave GmbH kommerzielle Softwarelösungen für Industriepartner an.

Leistungsfähige Simulationsprogramme für das Design photonischer Kristalle

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Lin Zschiedrich, Sven Burger

Kooperationspartner: Alfred Forchel (Julius-Maximilians-Universität, Würzburg), Jan-Robert van Look, Helmut Heidrich (Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik, Heinrich-Hertz-Institut, Berlin), Christian Herrmann, Ortwin Hess (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Stuttgart), Cecile Jamois, Thorsten Geppert (Max-Planck-Institut für Mikrostrukturtechnik, Halle), Andreas von Rhein, Ralf Wehrspohn (Universität Paderborn), Reinhard März (Infineon Technologies AG, München), Christoph Wächter (Fraunhofer Institut für angewandte Optik und Feinmechanik, Jena), Klaus Wandel (Sentech Instruments GmbH, Berlin), Carsten Henkel (Universität Potsdam).

Förderung: BMBF-Projektverbund: Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation.

In diesem Projekt werden in Zusammenarbeit mit Partnern aus der Industrie und aus Forschungsinstituten Simulationsumgebungen entwickelt, die die numerische Untersuchung von photonischen Kristallen (PhC) ermöglichen. Photonische Kristalle sind optisch transparente Materialien, deren Brechungsindex auf der Skala der Wellenlänge des Lichts moduliert ist. Photonische Kristalle besitzen vielfältige Anwendungen, z.B. in der optischen Telekommunikation, der Laserphysik und der Glasfasertechnik [8].

In der integrierten Optik sind photonische Kristalle ein wichtiger Forschungsbereich, weil sie einerseits die Miniaturisierung komplexer Bauteile ermöglichen, andererseits völlig neue Eigenschaften in der Manipulation von Licht, wie z.B. einen negativen Brechungsindex, aufweisen können.

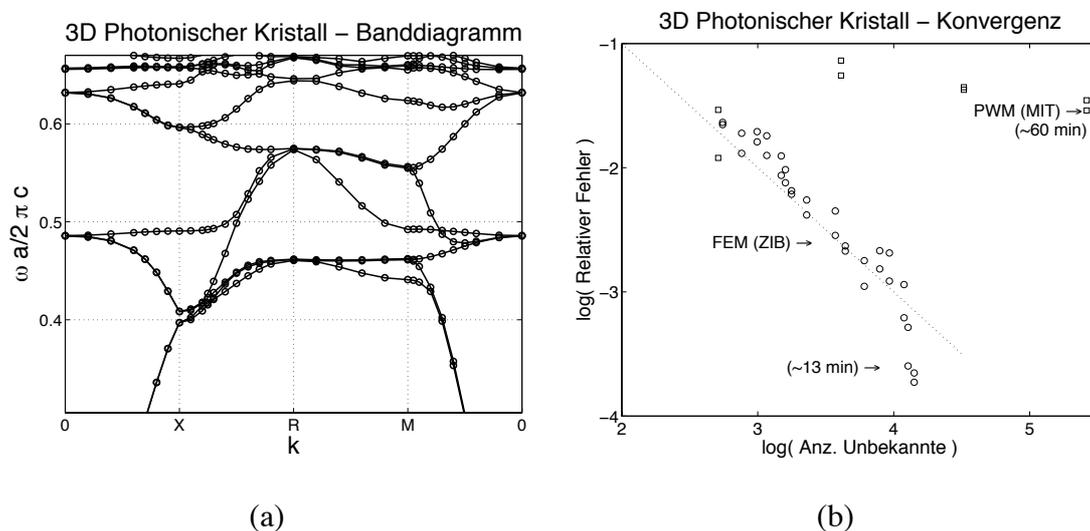


ABBILDUNG 2.7: a) Banddiagramm eines 3D photonischen Kristalls (einfaches kubisches Kristallgitter von Sphären mit Brechzahl $n = \sqrt{13}$, Hintergrund mit $n = 1$). Von Interesse sind hier u.a. die Bänder mit geringem Anstieg (niedrige Gruppengeschwindigkeit des Lichtes). b) Konvergenz der Eigenwerte zu fundamentalen Moden eines 3D photonischen Kristalls (○: Eigenwerte berechnet mit dem am ZIB entwickelten Finite-Elemente-Programm, □: Eigenwerte berechnet mit dem am MIT entwickelten Programm *MPB*). Der Vergleich mit den Resultaten der Plane-Wave-Methode (*MPB*) zeigt die Vorteile der FE-Methode. Die Zeitangaben sind Rechenzeiten auf dem für die Rechnungen verwendeten PC (Intel Pentium IV, 2.5 GHz).

Für das Design dieser Komponenten sind zuverlässige und schnelle Simulationsrechnungen notwendig, die Lösungen mit hohen Genauigkeiten liefern. Die von den Anwendern am häufigsten benutzten numerischen Methoden sind die Expansion der Felder in ebene Wellen (PWM) zur Bestimmung von Banddiagrammen und Finite-Differ-

ence-Time-Domain-Simulationen zur Bestimmung der Lichtstreuung an photonischen Kristallen. Als Alternative zu diesen beiden Methoden werden am ZIB auf finiten Elementen und schnellen Lösungsverfahren beruhende Simulationsumgebungen entwickelt, die für die relevanten Probleme wesentlich genauere Ergebnisse mit einem geringen Rechenaufwand bieten.

Im Berichtszeitraum wurde der schnelle Finite-Elemente-Löser für Banddiagramme photonischer Kristalle weiterentwickelt. Wichtige Erweiterungen waren dabei die Implementierung von finiten Elementen und periodischen Randbedingungen in 3D. Hierdurch wurden die Berechnungen von 3D photonischen Kristallen und photonischen Kristallen in Schichtstrukturen mit hoher Präzision möglich. Eine weitere wichtige Entwicklung war die Implementierung eines Fehlerschätzers. Dies erlaubt die schnelle und verlässliche Berechnung von geführten Moden in Wellenleitern, die auf photonischen Kristallen basieren [5].

Die Überlegenheit der Finite-Elemente-Methode mit speziell angepassten Solvern für große, dünn besetzte Gleichungssysteme [2] gegenüber der Ebene-Wellen-Methode kommt nicht nur in der Konvergenzgeschwindigkeit der Lösungen zum Ausdruck, sondern zeigt sich auch in der Rechenzeit. In Abbildung 2.7 sind ein typisches Banddiagramm für einen photonischen Kristall und ein Vergleich der Leistungsfähigkeit der am ZIB entwickelten und der weit verbreiteten, am MIT entwickelten Simulationssoftware dargestellt.

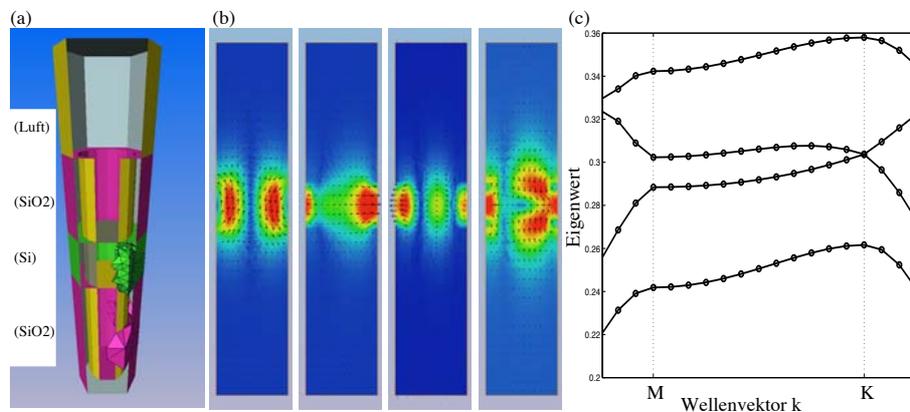


ABBILDUNG 2.8: a) Geometrie der Einheitszelle eines hexagonalen photonischen Kristalls in einer Schichtstruktur (die lichtführende Si-Schicht hat eine Dicke von 350 nm, die Gittervektoren haben eine Länge von 450 nm). b) Querschnitte durch die 3D Lichtverteilungen für die Lösungen zu den vier niedrigsten Eigenwerten am K -Punkt. c) Ausschnitt aus dem entsprechenden Banddiagramm.

Abbildung 2.8 zeigt Resultate von Untersuchungen zu photonischen Kristallen in lichtleitenden Schichtstrukturen, wie sie von Projektpartnern am MPI Halle und am HHI Berlin gefertigt werden. Von Interesse sind hier die Lichtverteilungen im Substrat (Ab-

bildung 2.8b) und die Eigenschaften der geführten Moden, die sich aus dem Banddiagramm ermitteln lassen (Abbildung 2.8c).

Eine in diesem Zusammenhang noch nicht gelöste Frage ist die numerische Behandlung von abstrahlenden Moden (*leaky modes*). Die Implementierung von transparenten Randbedingungen zur Behandlung dieser Fragestellung wurde vorbereitet [9] und ist für das Jahr 2004 geplant.

Berechnung von geführten Plasmon-Polariton-Wellen an dünnen Metallfilmen

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Lin Zschiedrich

Kooperationspartner: Reinhard März, Infineon Technologies AG, Helmut Zarschizky, Siemens AG

Dünne metallische Filme zwischen Dielektrika können als optische Wellenleiter verwendet werden. Die Filme weisen üblicherweise Breiten im zweistelligen Mikrometerbereich auf, während die Dicken der Filme im Bereich weniger Nanometer liegen. Entscheidend für die optischen Wellenleitereigenschaften solcher Anordnungen ist, dass Edelmetalle im Bereich optischer Wellenlängen über Permittivitäten mit negativen Realteilen und kleinen Imaginärteilen verfügen. Diese Eigenschaft ähnelt dem Verhalten von Elektronengasen beziehungsweise von kalten Plasmen. Das Spektrum von metallischen Filmwellenleitern umfasst sowohl gebundene als auch abstrahlende Moden (*leaky modes*). Es werden sehr hohe Genauigkeitsanforderungen an die zu berechnenden Propagationskonstanten gestellt. Wegen der komplexen Permittivität liegen diese Zustände nicht randständig im Spektrum. Darüber hinaus bilden sich an den Ecken des metallischen Films stark lokalisierte Singularitäten aus.

Die Abbildung 2.9 zeigt die Isolinien der z -Komponente des Poyntingvektors einer gebundenen Mode, die sowohl symmetrisch bezüglich der x - als auch der y -Achse ist (ss_b^0 -Mode). Im Feldverlauf ähnelt sie der Grundmode klassischer Schichtwellenleiter. Allerdings sind im Zoom die Singularitäten an den Ecken deutlich zu erkennen. Abbildung 2.10 zeigt das zugehörige elektrische Feld. Im Zoom erkennt man den sprunghaften Abfall des Feldes im Metall. Dieser kann nur unter Verwendung von rot-konformen Finiten Elementen (Kantenelementen) simuliert werden.

Vom mathematischen Standpunkt aus erzwingen die obigen Anforderungen die Verwendung von adaptiven finiten Elementen. Ist man an der Berechnung von abstrahlenden Moden interessiert, so müssen transparente Randbedingungen für Eigenwertprobleme konstruiert werden. Dies motiviert unter anderem das weiter unten genannte Projekt zur Konstruktion transparenter Randbedingungen für Resonanzprobleme.

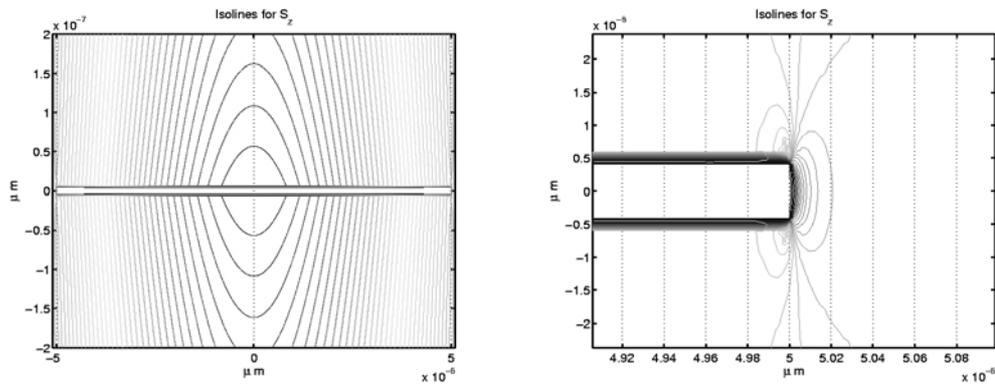


ABBILDUNG 2.9: Links: Absolutbetrag des Poyntingvektors (z-Komponente) für eine ss_b^0 -Mode. Rechts: Der Zoom in die Ecke des Metallfilms zeigt das singuläre Verhalten der Lösung. Um den Metallfilm drängen sich die Isolines sehr dicht.

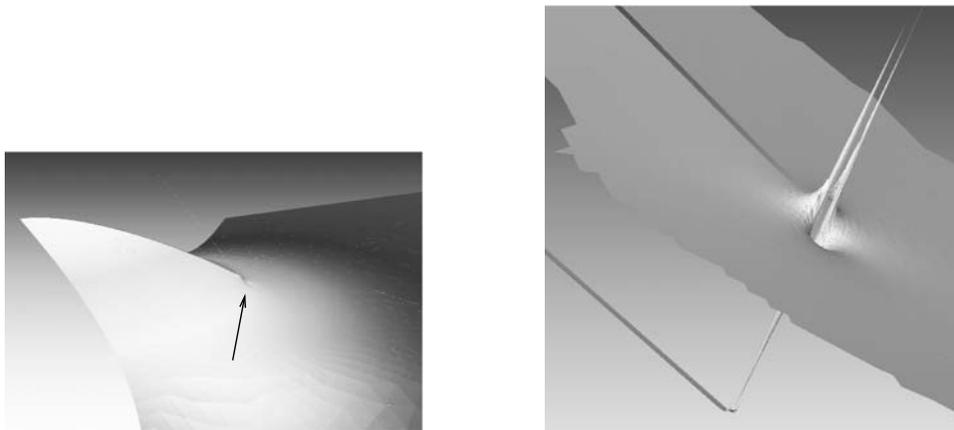


ABBILDUNG 2.10: Links: Elektrische Feldstärke einer ss_b^0 -Mode. Die Breite des Kamms der Mode entspricht in etwa der Breite des Metallfilms. Die Singularität an der Ecke ist nur schwach zu erkennen. (Pfeil) Rechts: Zoom in die Ecke des Metallfilms. Deutlich zu erkennen sind das sprunghafte Abfallen der Feldstärke im Bereich des Metallfilms und das singuläre Feldverhalten an den Ecken.

Polbedingung — ein neues Konzept zur Lösung von Aussenraumproblemen

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Roland Klose, Achim Schädle, Lin Zschiedrich

Kooperationspartner: Thorsten Hohage, Universität Göttingen

Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt D9, BMBF-Verbundprojekt “Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation”

Viele technisch interessante optische Probleme lassen sich nur dann richtig model-

lieren, wenn man eine reflektionsfreie Ausstrahlung von optischen Wellen in einen praktisch unendlich großen Umgebungsraum um das zu untersuchende Objekt garantiert. Numerische Simulationen schränken aber gewöhnlich das Rechengebiet auf einen kleinen Bereich um das Objekt ein. Damit der unendlich große Außenraum aber richtig erfasst wird, müssen die Randbedingungen des endlichen Rechengebiets für abstrahlende Felder *transparent* sein. Abweichungen von der Transparenz führen zu künstlichen Reflexionen am Rand des Simulationsgebiets und machen das Rechenresultat unbrauchbar. Wesentliche Nachteile der bisher verwendeten Methoden zur Konstruktion transparenter Randbedingungen sind z. B. die notwendige Kenntnis von Grundlösungen des Aussenraumproblems (Randintegralmethoden) oder eingeschränkte Gültigkeit (asymptotische Methoden). Das von uns in den Vorjahren entwickelte Konzept der Polbedingung [1] hat sich inzwischen zu einer eigenständigen Methodenkategorie zur Lösung von Aussenraumproblemen verschiedenster Arten entwickelt. Das Polbedingungskonzept besteht aus zwei Grundideen: Die eine ist die Diskretisierung des Aussenraums mit Hilfe von Strahlen, die vom künstlichen Rand ins Unendliche laufen, die zweite ist die Betrachtung der Laplace-transformierten Felder auf jedem einzelnen Strahl. Die Polbedingung besagt, dass eine Lösung genau dann ausstrahlend ist, wenn ihre Laplace-Transformierte auf keinem der Strahlen einen Pol in der unteren komplexen Halbebene besitzt. In zwei ersten zusammenfassenden Publikationen [3, 4] wurden die wichtigsten theoretischen Resultate bzgl. der Helmholtzgleichung dargestellt. Wir konnten zeigen, dass die Polbedingung äquivalent zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung ist, was die Methode theoretisch absichert. Im Gegensatz zur Sommerfeldbedingung gilt die Polbedingung aber auch für unbeschränkte Hindernisse und heterogene Materialien und bietet daher eine substantielle Erweiterung des klassischen Zugangs. Weiterhin liefert die Polbedingung eine explizite Darstellungsformel für die Aussenraumlösung. Mit Hilfe dieser Darstellungsformel konnten wir die exponentielle Konvergenz der Perfectly-Matched-Layer (PML) Methode nachweisen, wenn als Diskretisierung die Strahlendiskretisierung zugrunde gelegt wird. Neben der PML als einer Form der Realisierung der Polbedingung wurden inzwischen mehrere andere Verfahren entwickelt, denen allen gemeinsam ist, dass sie auf Eigenschaften der Laplace-Transformierten beruhen. Eine neue Methode innerhalb dieser als Laplace-Domain-Methoden bezeichneten Verfahren schränkt die zulässigen Funktionen der komplexen Ebene auf diejenigen ein, deren L^2 -Werte auf der reellen Achse zum Hardy-Raum \mathbf{H}^- gehören. Die Diskretisierung dieses Raumes berücksichtigt die Polbedingung schon im Ansatzraum, was die algorithmische Realisierung stark vereinfacht. Ein weiteres neues Resultat betrifft die Maxwell'schen Gleichungen in 2D. Wir konnten zeigen [9], dass die Polbedingung auch hier gilt und auf eindeutige Weise abstrahlende Lösungen charakterisiert.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Iterative Löser für die Helmholtzgleichung (Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Kooperation: Ralf Hiptmair, SAM, ETH Zürich, Schweiz; Martin Gan-

der, McGill University, Kanada; Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt D9)

Bei der Diskretisierung der zeitharmonischen Maxwellgleichungen mit einem Galerkinansatz und finiten Elementen erhält man große dünn besetzte und unsymmetrische indefinite lineare Gleichungssysteme. Die Lösung dieser Gleichungssysteme ist bei der Berechnung elektromagnetischer Felder in zwei Raumdimensionen der zeitaufwändigste Teil.

Bekanntes und weitverbreitetes Vorkonditionierer wie Mehrgitterverfahren und Gebietszerlegungsalgorithmen, die für positiv definite Gleichungssysteme hervorragend funktionieren, arbeiten im vorliegenden Fall nicht mehr optimal oder versagen gänzlich.

Im Berichtszeitraum haben wir untersucht, inwieweit Ideen aus der Fluidodynamik, die bei der Berechnung von Gleichgewichtszuständen erfolgreich eingesetzt werden, auf die Berechnung von eingeschwungenen Zuständen in der Elektrodynamik übertragen werden können. Es stellte sich heraus, dass eine Übertragung nicht möglich ist, daher wurde diese Idee wieder fallen gelassen.

Als erfolgsversprechender haben sich spezielle an der Physik orientierte Gebietszerlegungsalgorithmen herausgestellt. Im Gegensatz zu den weit verbreiteten und für positiv definite Probleme erfolgreichen Gebietszerlegungsalgorithmen, die an den Gebietsrändern Dirichlet- und/oder Neumannbedingungen koppeln, soll nun der Informationsaustausch zwischen den Nachbargebieten mit Hilfe der Approximation der DtN-Abbildung stattfinden. Dadurch ist es möglich, die in einem Teilgebiet gestreute Welle in die Nachbargebiete einzukoppeln.

Hierzu gibt es bereits erste Ergebnisse für ein an photonischen Kristallen orientiertes Modellproblem. Betrachtet wird die Streuung an mehreren Zylindern. Für jeden einzelnen Zylinder kann die gestreute Welle über eine Reihenentwicklung berechnet werden. Die gestreute Welle dient nun als einfallendes Feld für alle anderen Zylinder. Es zeigt sich, dass der iterative Prozess bei schwacher Kopplung der Streuer gut konvergiert.

HelmPole: Eine Simulationsplattform zur Lösung von elektromagnetischen Streuproblemen (Frank Schmidt, Lin Zschiedrich, Sven Burger, Roland Klose, Achim Schädle; Kooperation: Infineon Technologies AG, Research Area Photonics, Reinhard März; MPI für Mikrostrukturtechnik, Halle, AG Ulrich Gösele; Universität Würzburg, Technische Physik, AG Alfred Forchel; Universität Paderborn, AG Ralf Wehrspohn; HHI Berlin, AG Helmut Heidrich; ETH Zürich, AG Vahid Sandoghdar; Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt D9, BMBF-Projektverbund: Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation)

Integriert optische Chips verbinden miniaturisierte optische Bauelemente auf einem gemeinsamen Substrat, wobei die Kopplung zwischen den Komponenten, sowie die Einkopplung des Lichts von außerhalb über Wellenleiterstrukturen erfolgt. Die Be-

rechnung der Lichtausbreitung in integriert optischen Chips führt auf elektromagnetische Streuprobleme mit unbeschränktem, heterogenem Außenraum.

Die numerische Lösung mit der Methode der Finiten-Elemente erfordert die Konstruktion von transparenten Randbedingungen. Die Simulationsplattform HelmPole, ein Finite-Elemente-Programm zur Lösung zweidimensionaler Streuprobleme, basiert auf den theoretischen Resultaten in [1]. Als transparente Randbedingung wurde eine neue Variante der klassischen PML-Methode implementiert, die im Gegensatz zu anderen Verfahren wesentlich weniger einschränkende Bedingungen bezüglich der Außenraumgeometrie voraussetzt, so dass z.B. Geometrien mit in den Außenraum laufenden Wellenleitern ermöglicht werden.

Im Berichtszeitraum konzentrierten sich die Arbeiten an HelmPole auf die Implementierung von Schnittstellen zu weiteren Problemklassen. Mit HelmPole bieten wir unseren Kooperationspartnern aus Industrie und Forschung jetzt ein Simulationspaket, das eine flexible Anpassung an vielfältige relevante zweidimensionale Streuprobleme ermöglicht [6].

Resonanzen in offenen Systemen (Frank Schmidt, Lin Zschiedrich, Roland Klose; Kooperation: Thorsten Hohage, Universität Göttingen; Werner Koch, DLR-Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik Göttingen; Förderung: DFG-Forschungszentrum Mathematik für Schlüsseltechnologien, Teilprojekt D9)

Resonanzen sind Eigenschwingungen von Körpern, die in den Umgebungsraum des Resonanzkörpers abstrahlen und somit, wenn keine neue Schwingungsenergie zugeführt wird, zeitlich abklingen. Resonanzen, die man als Verallgemeinerung von Eigenlösungen ansehen kann, spielen in vielen Gebieten der Technik eine wichtige Rolle. In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit akustischen Resonanzen, wie sie beim Start von Flugzeugen an Tragflächen auftreten, und mit sogenannten “leaky modes” von photonischen Kristallen. Die zentrale Idee ist, die Polbedingungstheorie, die wir für optische Streuprobleme entwickelt haben, auf die Resonanzprobleme zu übertragen. Der wichtige Vorteil des Polbedingungsansatzes ist es, dass es damit gelingt, die Eigenwertstruktur der Resonanzprobleme zu erhalten. Das ermöglicht die Verwendung etablierter numerischer Pakete zur Eigenwertberechnung. Erste Ergebnisse aus Akustik und Optik für 1D-Probleme liegen vor und bestätigen die Realisierbarkeit des Konzepts.

Transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung (Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Kooperation: Mathias Ehrhardt, TU Berlin; Xavier Antoine und Christophe Besse, Universite P. Sabatier, Toulouse, Frankreich; Anton Arnold, Universität Münster, Münster; Ivan Sofronov, Russian Academy of Sciences, Moskau, Russland; Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt D9)

In Zusammenarbeit mit Mathias Erhardt vom DFG-Forschungszentrum und den oben

genannten Partnern arbeiten wir an einem Vergleich der von den verschiedenen Gruppen entwickelten transparenten Randbedingungen für die Schrödingergleichung.

Ein Ziel dieser Arbeit ist, Zusammenhänge zwischen den einzelnen Verfahren herauszuarbeiten, diese noch weiter zu verbessern und die Darstellung zu vereinheitlichen. Die unterschiedlichen Herleitungen transparenter Randbedingungen haben teilweise auf verschiedenen Diskretisierungsniveaus zu äquivalenten Verfahren geführt. Zudem führen die verschiedenen Herangehensweisen zu unterschiedlichen Fehlerabschätzungen und Stabilitätsaussagen.

Publikationen

- [1] F. Schmidt: *Solution of Interior-Exterior Helmholtz-Type Problems Based on the Pole Condition Concept: Theory and Algorithms. Habilitationsschrift, Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, 2002.*
- [2] P. Deuffhard, F. Schmidt, T. Friese, and L. Zschiedrich: *Adaptive Multigrid Methods for the Vectorial Maxwell Eigenvalue Problem for Optical Waveguide Design*, in W. Jäger and H. J. Krebs (eds.) *Mathematics - Key Technology for the Future*, 279–293, Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [3] T. Hohage, F. Schmidt, L. Zschiedrich: *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition. I: Theory*. *SIAM J. Math. Anal.*, **35** (2003), no. 1, 183–210.
- [4] T. Hohage, F. Schmidt, L. Zschiedrich: *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition. II: Convergence of the PML method*. *SIAM J. Math. Anal.*, **35** (2003), no. 3, 547–560.
- [5] S. Burger, F. Schmidt and L. Zschiedrich: *A fast and efficient Finite-Element Solver for 2D and 3D Photonic Band-Gap Problems*. *Dig. LEOS/IEEE 2003 Summer Topicals* (2003), 75–76.
- [6] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, and L. Zschiedrich, *HelmPole - A finite element solver for scattering problems on unbounded domains: Implementation based on PML*, Report 03–38, ZIB, 2003.
- [7] R. Hiptmair and A. Schädle, *Non-reflecting boundary conditions for Maxwell's equations*, *Computing*, **71** (2003), no. 3, 265–292.
- [8] R. März, S. Burger, S. Golka, A. Forchel, C. Herrmann, C. Jamois, D. Michaelis, and K. Wandel: *Planar High Index-Contrast Photonic Crystals for Telecom Applications* In: *Photonic Crystals - Advances in Design, Fabrication and Characterization*, Eds.: K. Busch et al., Wiley-VCH (2004), 308–329.
- [9] M.-H. Farshbaf-Shaker: *Ein neues Verfahren zur Lösung des Streuproblems der Maxwell-Gleichungen*. Diplomarbeit, Universität Hamburg und ZIB, (2003).

2.2.3 Computergestützte Therapie- und Operationsplanung

Das am ZIB etablierte Gebiet der computergestützten Therapie- und Operationsplanung bildete weiterhin einen Tätigkeitsschwerpunkt. Die Arbeiten erstreckten sich von der mathematischen Modellierung über die Algorithmenentwicklung bis hin zum Software-Design und anwendungsorientierten Entwicklungen für klinisch einsetzbare Systeme. Da die Grundlage der Planung vor allem Bilddaten sind, aus denen anatomische Modelle und Berechnungsgitter erzeugt werden, erfolgten die Entwicklungen im engen Wechselspiel mit den Projekten des Schwerpunkts "Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse" (S. 52). Neue Projekte wurden in den Anwendungsgebieten Neurochirurgie, chirurgische Onkologie, chirurgische Orthopädie und Gefäßchirurgie gestartet.

Computergestützte 3D-Operationsplanung, Weichgewebe- und Mimiksimulation für die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Bodo Erdmann, Evgeny Gladilin, Andreas Schlüter, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Kantonspital Basel, Klinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Schweiz, sowie Center of Advanced Cranio-Maxillofacial Surgery am Klinikum rechts der Isar, Technische Universität München); Thomas Hierl (Universitätsklinikum Leipzig, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie und Plastische Chirurgie); Emeka Nkenke (Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg); Anders Westermarck (Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden)

Das Verfahren zur direkten Knochenschnitt- und -umstellungsplanung am computergrafischen 3D-Schädelmodell wurde mittlerweile in mehr als 15 klinischen Fällen erfolgreich eingesetzt und dabei ständig weiter entwickelt. Symmetrieaspekte auf Basis kephalometrischer Analysen lassen sich im Rahmen der Umstellungsplanung berücksichtigen, und Knochenaugmentationen können gezielt geplant und hinsichtlich der resultierenden Weichgewebeanordnung bewertet werden. Im Rahmen der Osteotomieplanung fand insbesondere das Konzept des Anzeichnens von Schnittlinien auf der Knochenoberfläche (Abbildung 2.11 links) mit der Möglichkeit der Bewertung des Schnittverlaufes sowie dessen Auswirkung auf Risikostrukturen, wie z.B. Zahnwurzeln, Nerven und Blutgefäße vor dem eigentlichen Schnitt große Akzeptanz von Seiten der klinischen Partner [11]. Mit Chirurgen aus Stockholm und aus Erlangen wurden am ZIB mehrere Planungen durchgeführt. Mit den klinischen Partnern in München und Basel erfolgten gemeinsame, netzverteilte Planungen unter Nutzung der im CoDiSP-Projekt (siehe S. 69) erarbeiteten Möglichkeiten [12].

Aus einer weiteren Untersuchung ergab sich, dass die Kombination von Gipsmodellen mit CT-Daten eine exaktere Einstellung der dentalen Okklusion ermöglicht - insbesondere wegen der häufig durch Zahnfüllungen bzw. dauerhaft fixierten Zahnspangen

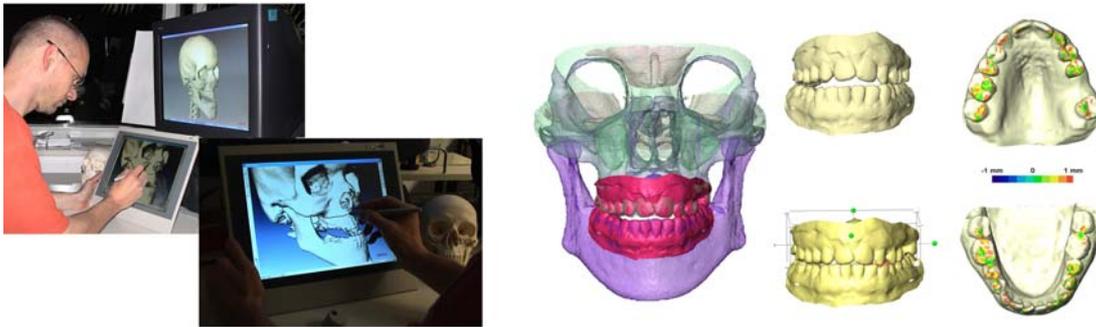


ABBILDUNG 2.11: *Links:* 3D-Osteotomieplanung am Grafiktablett. *Rechts:* Oberkieferverlagerung unter Berücksichtigung der korrekten Zahnstellung, Bestimmung von Kontaktbereichen durch Kollisionskontrolle und Quantifizierung der Zahnabstände für die kieferorthopädische Therapie.

(*Brackets*) hervorgerufenen Abschattungsfehlern im CT [9]. Die aus der Knochenverlagerung unter Kollisionskontrolle resultierenden Vorgaben zur Korrektur der Zahnstellung lassen sich durch die Details des geometrischen Modells wesentlich genauer quantifizieren und für die kieferorthopädische Behandlung nutzen (Abbildung 2.11 rechts). Mit der AG Dr. Jost-Brinkmann, Zentrum für Zahnmedizin, Abt. für Kieferorthopädie und Orthodontie, Charité, wurden Kooperationsgespräche zu einer weitergehenden Nutzung dieser Techniken geführt.

Aus der Kooperation mit dem Universitätsklinikum Leipzig ergaben sich erste wichtige Ergebnisse zur Validierung der Weichgewebesimulation. Mit Hilfe von prä- und postoperativen CT-Daten kann die Knochenverlagerung exakt reproduziert werden, so dass die räumliche Weichgewebivorhersage auf Basis der bislang erarbeiteten Modellierungsansätze [3] mit den tatsächlichen Resultaten verglichen werden kann. Erste Ergebnisse mit homogenen und inhomogenen Gewebemodellen, variierenden histomechanischen Parametern und einem linear-elastischen Modellierungsansatz zeigen bereits eine gute Übereinstimmung (Abbildung 2.12) [13, 14]. Weitere Vergleiche mit nichtlinearen Modellierungsansätzen, auch unter Berücksichtigung von Anisotropie durch Hautspannungslinien und Muskelfaserrichtungen sind Schwerpunkt künftiger Untersuchungen.

Heterogene muskuloskelettale Modellierung und Simulation der Tibia

Bearbeitet von: Rainald Ehrig, Bodo Erdmann, Ulrich Nowak, Stefan Zachow, Milka Trifunovic, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Georg Duda, Norbert Haas, Markus Heller, Bill Taylor, (Charité Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Förderung: Klinische Forschergruppe Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese, DFG

Im Jahr 2003 wurde die Kooperation mit der Charité verstärkt fortgesetzt. Abgeschlossen wurde im Berichtszeitraum die Analyse der Hautmarkerproblematik. Anhand der

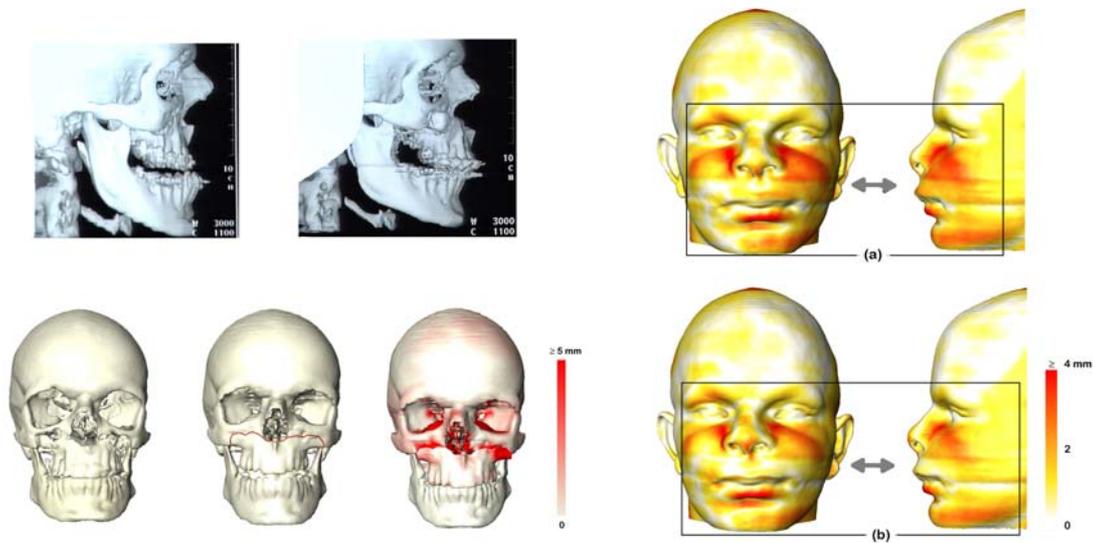


ABBILDUNG 2.12: *Links*: Reproduktion der Knochenumstellung anhand postoperativer CT-Daten (seitliche und frontale Ansicht). *Rechts*: Farbkodierte Darstellung der Abweichung zwischen tatsächlichem Resultat (2 Wochen nach der OP) und der numerischen Weichgewebesimulation: a) bei Verwendung eines homogenen und b) eines inhomogenen linear-elastischen Weichgewebemodells.

aus Messungen an Schafen gewonnenen Gangdaten wurde gezeigt, dass kein Verfahren eine zuverlässige Reduktion der durch Weichgewebewebewegungen verursachten Fehler in der Positionsbestimmung der darunter liegenden Knochen ermöglicht. Offen ist noch, auf welche Weise dennoch hinreichend genaue Daten ohne den Einsatz von Knochenmarkern gewonnen werden können.

Eine für viele klinische Zwecke relevante Aufgabenstellung ist eine möglichst genaue Bestimmung von Gelenkpositionen. Auf Grundlage der umfangreichen zur Verfügung stehenden Haut- und Knochenmarkerdaten sowie mit Hilfe von simulierten Datensätzen wurde eine Reihe von Verfahren aus der Literatur verglichen und theoretisch analysiert. Es zeigt sich, dass unter realistischen Bedingungen nur Methoden hinreichend exakte Resultate liefern, die auf speziellen Koordinatentransformationen basieren, während alle Varianten der oft verwendeten Kugel-Fits wesentlich unzuverlässiger arbeiten.

Weiterhin wurde ein 3D-Programm zur inversen Dynamik des Schafbeins fertig gestellt. Damit ist ausgehend von den gemessenen Bodenreaktionskräften und den Bewegungen eine detaillierte Prognose der in den Gelenken auftretenden Kräfte und Momente möglich. Diese sollen nun mit den entsprechenden Daten verglichen werden, die mit Hilfe eines speziellen Implantats zur telemetrischen Messung der Knochenbelastungen in einem anderen Teilprojekt der Klinischen Forschergruppe gewonnen wurden.

Basierend auf einer Mehrkörpersimulation wird derzeit ein System zur dynamischen Simulation der Schafsextremitäten entwickelt. Hierbei ist die schwierigste Aufgabe die Modellierung der Kontrolle und Stimulation der Muskeln. Die Resultate der Vorwärtsdynamik sollen dann mit den Ergebnissen der inversen Dynamik abgeglichen werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Mikrovaskuläre Modellierung (Reinhard Hochmuth, Peter Deuffhard; Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1)

Regionale Hyperthermie ist ein seit vielen Jahren am ZIB laufendes Projekt. Dabei wird mittels Radiowellen Wärme im Inneren des Körpers eines Patienten erzeugt. Seit einer 1948 erschienen Arbeit des Biophysikers Pennes wird als quantitatives Modell für die Wärmeverteilung eine einfache Diffusionsgleichung mit einem Helmholtz-Term verwendet. Langfristiges Ziel ist, für das zugrunde liegende Multiskalenproblem ein heterogenes Gesamtmodell zu formulieren, vgl. [2]. In einem ersten Schritt wurden hierzu in [1] homogenisierte Mikromodelle für Gebiete mit “tropfenartigen” Kapillargefäßen hergeleitet. Im Berichtszeitraum verallgemeinerten wir diesen Ansatz auf Zellprobleme, die auch nicht-isolierte Blutregionen (vgl. Abbildung 2.13) zulassen [4]. Im Hinblick auf eine spätere Integration in ein heterogenes Gesamtmodell wurden

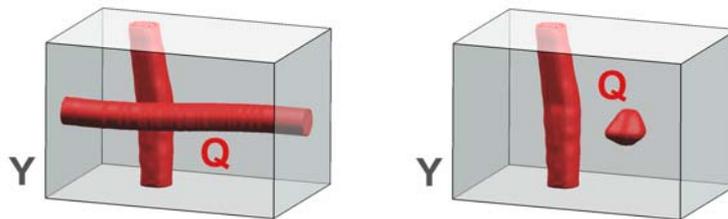


ABBILDUNG 2.13: Geometrie der periodischen Zellprobleme, als Basis zur mathematischen Homogenisierung.

ebenfalls für diese biologisch relevanteren Geometrien asymptotische Abschätzungen für die Korrektoren erster Ordnung bewiesen.

Temperatur- und Perfusionsidentifizierung in der Hyperthermie (Martin Weiser, Tobias Gänzler; Kooperation: Stefan Volkwein (Karl-Franzens-Uni Graz, Österreich), Peter Wust (Charité Berlin)); Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1)

Für eine zuverlässige Therapieplanung und -bewertung in der regionalen Hyperthermie ist die Messung von Temperatur und Durchblutung notwendig. In die vom kombinierten MR-Hyperthermie-Applikator während der Therapie zur Verfügung gestellten Meßwerte gehen jedoch beide Größen ein, so dass unter Berücksichtigung der Bio-Heat-Transfer-Gleichung eine Parameteridentifizierung erforderlich ist. Bei der Un-

tersuchung geeigneter Verfahren stellte sich heraus, dass erweiterte SQP-Methoden für diesen spezifischen Problemtyp offenbar keine Vorteile gegenüber gewöhnlichen SQP-Methoden aufweisen, die hier gute Ergebnisse liefern. Aufgrund der positiven Erfahrungen mit einem Matlab-Prototypen wurde mit der Implementierung des Identifizierungsalgorithmus in **KASKADE** begonnen.

Parallel dazu wurde ein einfacher strukturiertes Identifizierungsverfahren zur Online-Regelung der Therapieparameter konzipiert. Ein gemeinsam mit der Charité beantragtes und am Campus Virchow angesiedeltes DFG-Einzelprojekt hierzu wurde im Januar 2004 bewilligt.

Adaptive FEM-Simulation des menschlichen Unterkiefers (Bodo Erdmann; Kooperation: Cornelia Kober (Fachhochschule Osnabrück, Hightech-Forschungszentrum TU München), Jens Lang (Technische Universität Darmstadt), Robert Sader, Hans-Florian Zeilhofer (Kantonsspital Basel/Universitätskliniken, Schweiz, Hightech-Forschungszentrum TU München))

Effiziente und gleichzeitig zuverlässige Algorithmen eröffnen neue Möglichkeiten in der aktuellen biomechanischen Forschung. Ein Beispiel hierfür ist die Anwendung des am ZIB entwickelten adaptiven FEM-Codes **KASKADE** für die Simulation des Belastungsprofils im menschlichen Unterkiefer.

Wegen des grundlegenden Zusammenhangs zwischen der inneren Architektur und der äußeren Form knöcherner Organe mit den einwirkenden Belastungen, hier Kauen oder Beißen, lassen sich mit Hilfe der Simulation Veränderungen im Kieferknochen, z.B. Atrophierung nach Zahnverlust, besser erklären.

Das Simulationsmodell wurde im Berichtszeitraum schrittweise weiter an die anatomische Realität angepasst, bei gleichzeitiger Prüfung seiner Sensitivität. Es wurde ein neuer Zugang für die individuelle Umsetzung der Kaumuskulatur entwickelt. Die großen Schläfenmuskeln sind nun in ihrer typischen Fächerform im Modell implementiert, vgl. Abbildung 2.14. Hiermit konnten weitere Details im Dichteprofil aus den CT-Daten erklärt werden.

Therapieplanung in der Neurochirurgie (Stefan Zachow, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Kooperation: Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler (AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin))

Ziel dieses Projekts ist die computergestützte Planung operativer Korrekturen frühkindlicher Schädelneuropathien aufgrund vorzeitig verknöchender Schädelnähte (so genannter Kraniosynostosen). Dazu sollten zunächst quantifizierbare Planungskriterien für die chirurgischen Schädelumformung entwickelt werden. Basis für eine solche Planung sind aus einer statistischen Analyse stammende Schädelformvarianten gesunder Kinder im ersten Lebensjahr. In einem ersten Schritt wurde mit der Segmentierung der Knochenstrukturen aus bisher ca. 20 MRT-Datensätzen (Alter 3 bis 9 Monate) begonnen. Als Grundlage für die Formanalyse wurde zunächst der relevante Bereich des

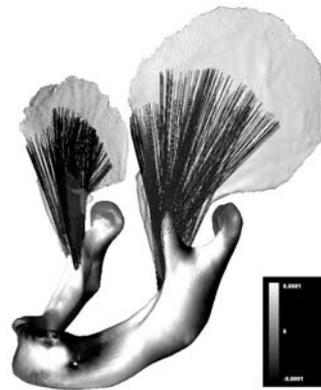


ABBILDUNG 2.14: Profil der Dehnung am Unterkiefer bei Modellierung der Kaumuskulatur als Faserbündel

Schädelknochens definiert und ein Algorithmus entwickelt, der diesen Bereich automatisch auf Basis einiger weniger anatomischer Landmarken bestimmt (vgl. Abbildung 2.15).

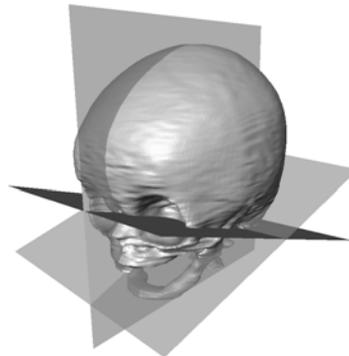


ABBILDUNG 2.15: Bestimmung des relevanten Schädelbereiches mittels anatomischer Landmarken (Nasen und Gehörgänge) für die Formanalyse des Schädelsknochens.

Computerunterstützte Prothesenkonstruktion bei Beckenresektionen (Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Kooperation: Thomas Lange, Sebastian Eulenstein, Peter Schlag (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin))

Die chirurgische Resektion von Tumoren aus dem Beckenknochen erfordert häufig die Implantation einer für die individuelle Beckengeometrie angepassten Prothese, um den fehlenden Knochenanteil zu ersetzen (vgl. Abbildung 2.16). Der computergestütz-

te Entwurf einer solchen Prothese ermöglicht zum einen eine Beschleunigung der Prothesenkonstruktion und ist zum anderen eine wichtige Voraussetzung für die präzise operative Umsetzung mittels eines Navigationssystems. Dazu ist es erforderlich, anatomische Landmarken und Kontaktflächen von Prothesen auf die individuelle Beckengeometrie des Patienten zu übertragen. Ein in anderen Projekten am ZIB entwickeltes statistisches Formmodell des Beckenknochens (siehe S. 52) wird zur automatischen Segmentierung aus den zugrundeliegenden medizinischen Bilddaten genutzt. Das Formmodell wird außerdem zur automatischen Bestimmung von Anteversion und Inklination der Hüftpfanne sowie zur automatischen Adaption des Prothesenschaftes an die individuelle Beckengeometrie eingesetzt. Eine Machbarkeitsstudie zeigte bereits gute Ergebnisse [15].

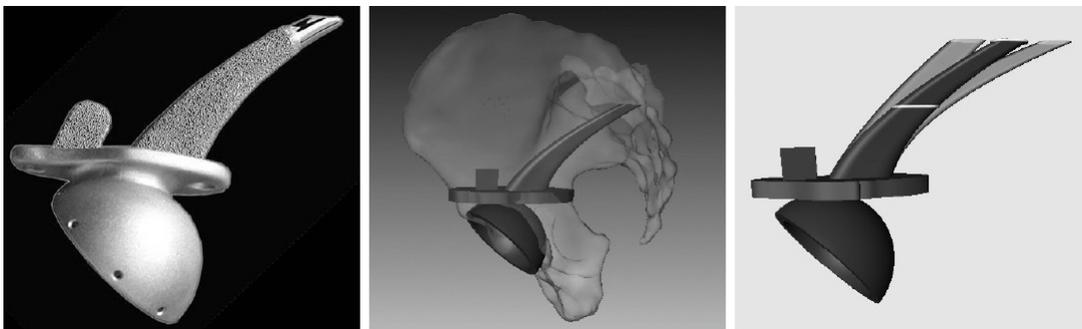


ABBILDUNG 2.16: (a) Foto einer Beckenprothese. (b) Darstellung einer virtuell implantierten Prothese im Becken. (c) Deformation des Prothesenschaftes.

Computergestützte 3D-Operationsplanung bei muskuloskelettalen Erkrankungen (Detlev Stalling, Hans-Christian Hege; Kooperation: Olaf Etzmuß, Indeed – Visual Concepts; Markus Heller, Georg Duda, Norbert P. Haas, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU; Förderung: Europäischer Fonds für regionale Entwicklung (EFRE))

Ziel ist die Entwicklung eines Systems zur Planung des totalen Gelenkersatzes an der Hüfte. Im ersten von vier Projektabschnitten wird ein Verfahren zur Rekonstruktion von 3D-Modellen des Beckens und des proximalen Femurs auf der Grundlage von zwei oder mehr *Projektionsröntgenbildern* entwickelt. Das Verfahren wird durch Atlas-basierte Methoden unterstützt. Danach sollen Verfahren zur interaktiven Positionierung und Orientierung der Implantate, zur geometrischen Analyse und zur Visualisierung der numerisch bestimmten muskulo-skelettalen Belastungen entwickelt werden.

Validierung von Strömungsberechnungen in kardiovaskulären Anwendungen (Christoph Petz, Detlev Stalling; Kooperation: Leonid Goubergrits, Klaus Affeld

(Charité Berlin, Labor für Biofluidmechanik); Andreas Spuler (Helios Klinikum Berlin))

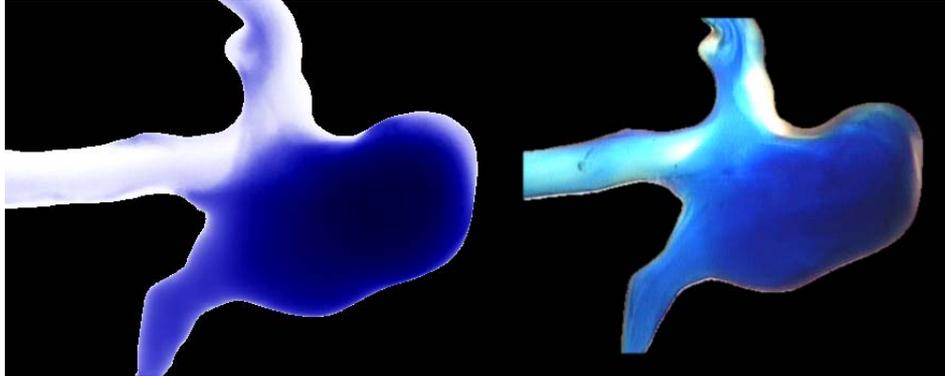


ABBILDUNG 2.17: Validierung einer Strömungsberechnung in einem Aneurysma durch den Vergleich eines experimentell durchgeführten und eines simulierten Farbauswaschversuchs. *Links*: Visualisierung der berechneten Farbstoffkonzentration zu einem Zeitpunkt. *Rechts*: Experimentell ermittelte Farbauswaschung zum selben Zeitpunkt.

Ziel dieses Projekts ist die Validierung von Strömungsberechnungen in kardiovaskulären Anwendungen, wie etwa der Behandlungsplanung für Aneurysmen (Gefäßausstülpungen). Strömungen in Blutgefäßen sind experimentell nur sehr schwer zugänglich, bzw. einige Eigenschaften sind gar nicht messbar. Daher wird auf numerische Strömungsmodelle zurückgegriffen. Um die komplexen und von vielen Parametern abhängigen Strömungsberechnungen experimentell zu validieren, führen die Kooperationspartner neben den Simulationen mit einem Silikonmodell Farbauswaschversuche experimentell durch. Mit Hilfe eines von uns entwickelten rein absorptionsbasierten Volume-Rendering-Verfahrens wird die berechnete zeitabhängige Dichteverteilung des Farbstoffes visualisiert. Etwaige Differenzen zwischen Simulation und Experiment können nun durch Vergleich der Bildsequenzen aus Visualisierung und Experiment aufgedeckt werden (vgl. Abbildung 2.17). Das Verfahren wird zur Zeit bei der Entwicklung verbesserter künstlicher Herzklappen eingesetzt.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard, R. Hochmuth, *Multiscale Analysis of Thermoregulation in the Human Microvascular System*, Math. Meth. in the Appl. Sci., **27**, p. 971–989, Wiley (2004)
- [2] P. Deuffhard, R. Hochmuth, *On the Thermoregulation in the Human Microvascular System*, Proc. Appl. Math. Mech. **3**, 2003.

-
- [3] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard und H.-C. Hege: *A Comparison of Physical Models of Deformable Soft Tissue for Craniofacial Surgery Simulations*. In: Lemke, H.U. et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Elsevier, S. 343–348 (2003)
- [4] R. Hochmuth, P. Deuffhard, *Multiscale Analysis for the Bio-Heat-Transfer Equation*, Report 03–08, ZIB, 2003.
- [5] C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Simulation (FEM) of the human mandible: a comparison of bone mineral density and stress / strain profiles due to the masticatory system*, Proc. 10th Workshop, “The Finite Element Method in Biomedical Engineering, Biomechanics and Related Fields”, Univ. Ulm, 2003, ISBN 3-9806183-6-6.
- [6] C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer: *Belastungssimulation beim menschlichen Biss im Vergleich mit der Dichtestruktur im Unterkieferknochen*. In: Beiträge zur gemeinsamen Jahrestagung der Deutschen, der Österreichischen und der Schweizerischen Gesellschaft für Biomedizinische Technik, Salzburg, Österreich, 27.-29. Sept., 2003, *Biomedizinische Technik* 48, 2003, Ergänzungsband 1, S. 268-269, (ISSN 0939-4990).
- [7] C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Simulation (FEM) des menschlichen Unterkiefers: Vergleich von Dichtestruktur und Belastungsprofil bedingt durch die Kaumuskulatur*, Poster bei der 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Biomechanik, München, 29.-31. Mai 2003.
- [8] J. Lang, B. Erdmann, C. Kober, P. Deuffhard, H.-F. Zeilhofer, R. Sader, *Effiziente und zuverlässige Finite-Elemente-Methoden zur Simulation des menschlichen Unterkiefers*, In: *Berichte des IZWR - Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen*, Band 1, 2003, pp. 49-57, Eds.: W. Alt, M. Hermann, Universität Jena, Germany.
- [9] E. Nkenke, S. Zachow, M. Benz, T. Maier, M. Kramer, G. Häusler, J. Wiltfang und F.-W. Neukam: *Dreidimensionale Analyse des Mittelgesichts nach LeFort I-Osteotomie und Vorverlagerung des Oberkiefers*. 53. Kongress der Deutschen Gesellschaft für Mund- Kiefer- und Gesichtschirurgie, Krefeld (2003)
- [10] W.R. Taylor, R.M. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, P. Klein, G.N. Duda, *Can Skin Markers Allow the Kinematics of Underlying Bones to be Determined?*, submitted to *Journal of Biomechanics*.
- [11] S. Zachow, E. Gladilin, R. Sader und H. -F. Zeilhofer: *Draw & Cut: Intuitive 3D Osteotomy planning on polygonal bone models*. In: Lemke, H.U. et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Elsevier, S. 362–369 (2003)

- [12] H.-F. Zeilhofer, S. Zachow, R. Sader, H.-C. Hege, K. Schwenzer und P. Deuffhard: *FaceLAB – Simulation der ästhetischen Veränderung nach Umstellungsosteotomien in der virtuellen Arbeitsumgebung*. 53. Kongress der Deutschen Gesellschaft für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Krefeld (2003)
- [13] S. Zachow, Th. Hierl und B. Erdmann: *Über die Qualität einer 3D Weichgewebeprädiktion in der Gesichtschirurgie: Ein quantitativer Vergleich mit postoperativen CT-Daten*. In: Tolxdorff, T. et al. (eds.): *Bildverarbeitung für die Medizin (BVM)*, Springer, S. 75–79 (2004)
- [14] S. Zachow, Th. Hierl und B. Erdmann: *Predictability of tissue changes after osteotomy planning in maxillofacial surgery: A comparison with postoperative results*. Erscheint in: Lemke, H.U. et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Elsevier pp. 648–653 (2004)
- [15] T. Lange, P.-U. Tunn, H. Lamecker, P. Scheinemann, S. Eulenstein und P.-M. Schlag: *Computerunterstützte Prothesenkonstruktion mittels statistischem Formmodell bei Beckenresektion*. In: Tolxdorff, T. et al. (Hrsg.): *Bildverarbeitung für die Medizin (BMV)*, zur Veröffentlichung angenommen (2004)

2.2.4 Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse

Im Zentrum der Aktivitäten dieses Schwerpunkts standen die modellbasierte Bildsegmentierung auf Basis statistischer 3D-Formmodelle, die 3D-Rekonstruktion aus hochaufgelösten mikroskopischen Schnittbildern und Bildregistrierung. Hinzu kamen spezielle Rekonstruktions- und Analyseverfahren für die Knochenfeinstruktur (aus μ CT-Daten) und kapillare Gefäßsysteme (aus konfokal-mikroskopischen Aufnahmen).

Modellbasierte 3D-Bildsegmentierung

Bearbeitet von: Hans Lamecker, Philipp Beckmann, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Martin Seebaß (Indeed – Visual Concepts), Peter Wust, Johanna Gellermann (Klinik für Strahlentherapie, Charité, Universitätsmedizin Berlin) Thomas Lange, Peter Schlag (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin) Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler (AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*”, Teilprojekt F2

Bildsegmentierung ist eine der grundlegenden Aufgaben der quantitativ orientierten Bildanalyse. Sie ist unter anderem Voraussetzung für die computergestützte Therapie- und Operationsplanung. Daher wird weltweit an effizienten, robusten und automatische Segmentierungsverfahren gearbeitet, die den harten Anforderungen der klinischen Routine gerecht werden.

Segmentierung ist im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe, da die gesuchten Objekte in den Daten häufig nur schwer vom Hintergrund zu trennen sind. Die Ursachen hierfür liegen sowohl in den Charakteristika der Bildmodalitäten (z.B. CT, MRT, US) als auch den Abbildungseigenschaften der Objekte selbst begründet. Trotz Rauschen, Inhomogenitäten innerhalb von Objekten oder Homogenität über verschiedene Objekte hinweg müssen Objektgrenzen sicher erkannt werden. Dies kann z.B. durch Einbeziehung von a-priori Wissen über Form, Grauwertverteilung und Textur der zu segmentierenden Objekte geschehen. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Methoden, mit denen sich a-priori Wissen über Form, Grauwertverteilung und Textur von biomedizinischen Objekten mathematisch erfassen und im Segmentierungsprozess nutzen lassen.

Formen werden in diesem Kontext mit orientierbaren 2-Mannigfaltigkeiten identifiziert. Die Etablierung von Formwissen in einem statistischen Modell setzt einen quantitativen Formvergleich voraus. Dazu müssen anatomisch korrespondierende Punkte auf unterschiedlichen Formen S^1, S^2 (z.B. zwei verschiedenen Beckenknochen) mittels einer bijektiven Korrespondenzfunktion $f : S^1 \rightarrow S^2$ aufeinander abgebildet werden. Zum Finden einer geeigneten Korrespondenzabbildung wählen wir einen funktionalen Ansatz. Ein Funktional $E[\phi]$, dessen Minimum $f = \min_{\phi} E[\phi]$ eine Korrespondenzabbildung liefert, muß invariant gegenüber euklidischen Transformationen sein. Nach dem Fundamentalsatz der Flächentheorie sind alle Eigenschaften einer Fläche, die unabhängig von einer euklidischen Transformationen sind, durch deren erste und zweite Fundamentalform charakterisiert. Das gesuchte Funktional ist also eine Funktion von metrischen Größen und Krümmung.

In einem ersten, vereinfachenden Ansatz wurde zunächst nur der konforme (winklerhaltende) Anteil der Metriken der Mannigfaltigkeiten berücksichtigt. Krümmungsinformation wurde als Randbedingung definiert, d.h. Linien hoher Krümmung werden explizit aufeinander abgebildet [2, 4].

Ist nun eine Menge von Formen gegeben, können diese mittels Korrespondenzabbildungen in einem gemeinsamen Vektorraum dargestellt und somit auch statistisch analysiert werden. Eine Hauptmodenanalyse der Vektoren liefert eine mittlere Form \bar{v} und die Hauptmoden der Variabilität p_k (siehe Abbildung 2.18, links). Die Aufgabe der Segmentierung liegt nun darin, die Gewichtungsfaktoren der Formmoden sowie eine euklidische Transformation $T \in SE(3)$ so zu bestimmen, dass das lineare Formmodell möglichst genau das zu segmentierende Objekt in den Bilddaten beschreibt (siehe Abbildung 2.18, rechts). Studien zur Segmentierung der Leber [3] und des Beckenknochens [7] aus CT-Daten zeigen bereits gute Ergebnisse.

Erkennung und Analyse räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Vincent Dercksen, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Sabine Gubatz, Patrick Schweizer (Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung, Gatersleben)

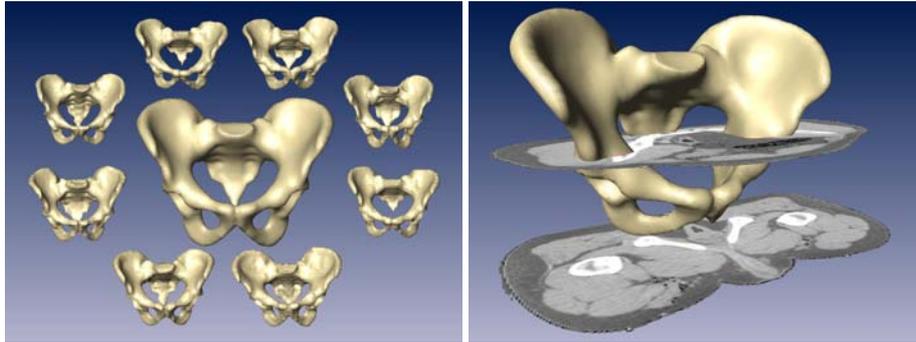


ABBILDUNG 2.18: *Links*: Mittlere Form eines Beckenknochens berechnet aus den ihn umgebenden individuellen Formen. *Rechts*: Segmentierung von CT-Daten mit einem statistischen Modell des Beckenknochens.

Förderung: BMBF-Verbundprojekt Bioinformatics Center Gatersleben-Halle

Im Rahmen des Verbundprojekts wird in der Nachwuchsgruppe „Erkennung und Analyse räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster“ die Entwicklung von Pflanzensamen untersucht. Auf Basis des am ZIB entwickelten 3D-Visualisierungssystems Amira werden dazu Verfahren entwickelt, die eine 3D-Rekonstruktion der Pflanzensamen aus hochaufgelösten mikroskopischen Schnittbildern ermöglichen. Die einzelnen Schnittbilder müssen zunächst gegeneinander ausgerichtet werden. Anschließend sind die Bilder zu segmentieren, so dass dann ein 3D-Modell rekonstruiert werden kann.

Die in Amira bereits vorhandenen Methoden wurden zu diesem Zweck weiterentwickelt. Insbesondere ist es nun möglich, die Alignierung auf sehr großen Bildstapeln durchzuführen, die nicht vollständig in den Hauptspeicher geladen werden können. Typischerweise müssen mehrere hundert Bilder mit einer Auflösung von mindestens 1.600 x 1.200 Pixeln verarbeitet werden, so dass sich ein Datenvolumen von einigen Gigabyte ergibt. Mit der neuen Zugriffsmethode bleibt ein hohes Maß an Interaktivität gewährleistet, mit relativ niedrigen Ansprüchen an die Hardware. Das Alignierungsmodul wurde um eine automatische grauwert-basierte Methode erweitert, mit der Möglichkeit neben Translation und Rotation auch (lineare) Skalierung anzuwenden. Auch die Korrekturmöglichkeiten wurden verbessert, insbesondere kann die Ausrichtung von bereits segmentierten Datensätzen nun nachträglich verbessert werden.

Im weiteren Projektverlauf soll die Segmentierung und 3D-Rekonstruktion von sehr großen Bildstapeln verbessert werden. Des Weiteren sollen neue Methoden zur Rekonstruktion zeitlich veränderlicher Modelle entwickelt werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Starre, affine und nicht-affine Bildregistrierung (Alexander Maye, Thomas Wenckebach, Hans Lamecker, Lilit Hakobyan, Hans-Christian Hege; Kooperation: Martin Seebaß, Olaf Etzmuß (Indeed – Visual Concepts), Torsten Rohlfing (Stanford Univer-

sity School of Medicine, Image Guidance Laboratories), Thomas Lange (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin))

Aufgabe der Bildregistrierung ist es, zwei oder mehr Bilddatensätze bestmöglich aufeinander abzubilden, d.h. geometrische Transformationen zu finden, die die in den Bildern abgebildeten Objekte so verschieben und ggf. auch verzerrten, dass sie räumlich möglichst gut übereinstimmen. Dieses Problem stellt sich in zahlreichen bildbasierten Anwendungen, wie z.B. multimodale Bildfusion, bildbasierte Chirurgie- und Behandlungsplanung, anatomische Rekonstruktion und Morphometrie [1, 5].

Ein Registrierungsverfahren ist durch drei Ingredienzen charakterisiert: ein Ähnlichkeitsmaß, eine Klasse von geometrischen Transformationen und ein Optimierungsverfahren zur Bestimmung der optimalen geometrischen Transformation. Die starre Bildregistrierung erlaubt nur Translation und Rotation, die affine läßt zusätzlich Skalierung und Scherung zu, während die FFD-Bildregistrierung Freiform-Deformationen (FDD) erlaubt.

Unser Verfahren bietet die drei genannten Klassen von geometrischen Transformationen. Für FFD wird ein Tensorprodukt von kubischen B-Splines verwendet, um Punkte eines regulären Kontrollgitters zu transformieren und dazwischen zu interpolieren. Die Bestimmung der gesuchten Transformation erfolgt durch Minimierung eines Funktionals, das neben einer Energie („Metrik“) die die Unähnlichkeit misst, auch Regularisierungsterme (elastische Energie, approximative Volumenerhaltung) enthält, um das Deformationsfeld zu glätten. Die Qualität der Korrespondenz wird mittels anwendungsspezifischer Metriken bestimmt. Bei unimodalen Daten werden euklidischer Abstand der Grauwerte bzw. für segmentierte Bilder Labelkonsistenz verwendet. Werden Daten registriert, deren Grauwertverteilungen eine lineare Beziehung aufweisen, z.B. T1/T2-gewichtete MRT-Daten, eignet sich die Grauwertkorrelation als Metrik. Liegt keine lineare Beziehung vor, z.B. bei multimodaler Registration, wird die Mutual Information verwendet – die gemeinsame Entropie (also der Informationsgehalt nach Shannon) die minimal wird, wenn die Bilder sich bestmöglich überdecken. Die Parameter der optimalen geometrischen Transformation werden durch Gradientenverfahren in einem Multiskalenverfahren gefunden.

Die Bildregistrierung wurde als Modul der Visualisierungs-Software Amira implementiert. Im Stereotaxie-Projekt wird sie angewendet zur interoperativen Platzierung eines Katheters im Patientenschädel entsprechend der präoperativen Planung. Im Projekt „Virtuelles Neurolabor“ (s. S. 64) ermöglicht sie die Registrierung neuronaler Strukturen in einem Gehirnatlas. Bei der Erzeugung statistischer 3D-Formmodelle (siehe S. 52) dient sie als Alternative zur Lösung des Korrespondenzproblems (vgl. Abbildung 2.19).

Analyse der Knochenfeinstruktur (Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege; Kooperation: Wolfgang Gowin, Peter Saporin, Gisela Beller und Dieter Felsenberg (Zentrum für Muskel- und Knochenforschung Charité, Universitätsmedizin Berlin), Jürgen

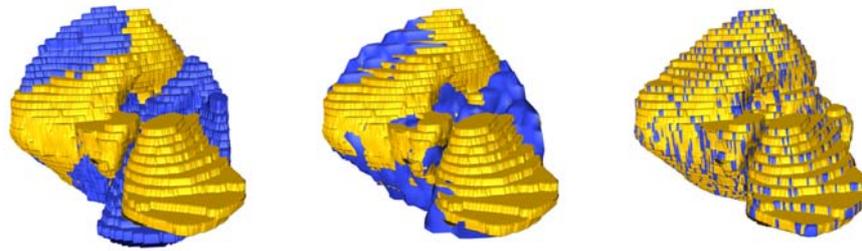


ABBILDUNG 2.19: Zwei segmentierte menschliche Lebern, repräsentiert durch Labelfelder, vor (links) und nach (rechts) nichtlinearer Registrierung.

Kurths und Norbert Marwan (Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik an der Universität Potsdam), Jesper Skovhus Thomsen (Dept. of Cell Biology, Institute of Anatomy, University of Aarhus, Dänemark); Förderung: European Space Agency (ESA) / European Space Research and Technology Center (ESTEC)

In der zweiten Phase (2003 - 2005) des Projekts ‘2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity’ werden neben Tibia-Biopsien [6] auch komplette Wirbelkörper in einer Auflösung von etwa 40μ in einem Micro-CT aufgenommen. Eine einzige Aufnahme produziert Daten in der Größenordnung von 10 GB. Die Speicherung der Daten und der Zugriff aller beteiligter Institutionen zur Auswertung und Visualisierung stellt eine beträchtliche Herausforderung da.

Die bisherige Architektur der Software **Amira** basierte auf der Annahme, dass die zu verarbeitenden Datensätze komplett in den Hauptspeicher des Rechners geladen werden können. Bei Daten dieser Größe ist das aber nicht mehr der Fall. Es wurde daher wurde ein grundsätzliches Redesign der Software vorgenommen, das aber Kompatibilität zu alten Programmteilen wahrt: Die Zugriffsschnittstelle auf Bilddaten wurde streng von der Implementierung getrennt. Zur Speicherung der Datensätze wurde das Dateiformat HDF5 in Amira integriert. In Zukunft wird damit der Remote-Zugriff aller Institutionen auf eine zentrale Datenbasis am ZIB möglich sein. Erste Tests beweisen die Machbarkeit.

Eine Visualisierung der Datensätze in der höchsten Auflösung macht nur für Teilvolumina Sinn, ist sie jedoch nötig, um die komplexe innere Struktur des menschlichen Knochens zu zeigen (Abbildung 2.20, rechts). Die Bilddaten werden progressiv in den Hauptspeicher übertragen, so dass der hochaufgelöste Ausschnitt interaktiv verschoben werden kann.

In Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern wurden Auswertungsverfahren neu- und weiterentwickelt sowie weitere Komplexitätsmaße auf ihre Tauglichkeit für die Analyse der Knochenfeinstruktur untersucht. Auch hier schaffte der Datenumfang neue Schwierigkeiten und erforderte algorithmische Veränderungen.

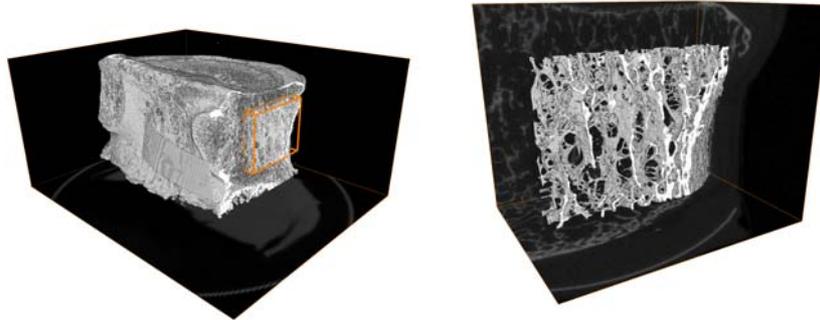


ABBILDUNG 2.20: Mikro-CT-Aufnahme eines Wirbelkörpers (Breite: ca. 2,5 cm, Gesamtgröße des Datensatzes: ca. 8 GB). *Links*: Überblicksansicht mit 150μ Voxelgröße. *Rechts*: interaktiv selektiertes Teilvolumen (im linken Bild durch Box angedeutet) mit 37μ Voxelgröße.

Aufbau und Adaptation von Mikrogefäßnetzwerken (Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege; Kooperation: Annemiek Cornelissen und Axel Pries (Institut für Physiologie, Freie Universität Berlin))

Ziel des Projektes ist es, die Adaption und das Wachstum von Blutgefäßnetzwerken zu untersuchen. Dazu werden bildgebende Verfahren eingesetzt, die es ermöglichen, in-vivo-Aufnahmen zu gewinnen. Die dabei auftretenden Schwierigkeiten lassen eine deutlich schlechtere Bildqualität als ex vivo erwarten.

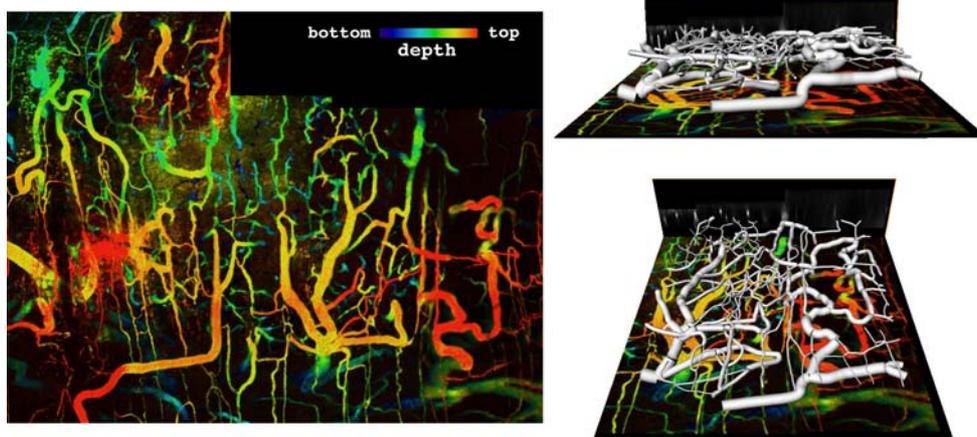


ABBILDUNG 2.21: Ausschnitt aus einem Gefäßnetzwerk um einen Tumor in einem Rattenrückemuskel. *Links*: Überblick, 2×1.5 mm, Tiefe farbkodiert. *Rechts*: Rekonstruiertes Gefäßnetzwerk.

Zur Vorbereitung eines Projektantrages wurde ein Ausschnitt einer konfokal-mikro-

skopischen Aufnahme eines Tumors in der Rückenmuskulatur einer Ratte untersucht (siehe Abbildung 2.21). Automatische Verfahren zur Rekonstruktion von Gefäßnetzwerken, die in einem früheren Projekt entwickelt wurden, scheiterten an der schlechten Bildqualität. Das Gefäßnetzwerk inklusive der lokalen Dicke wurde daher weitgehend manuell rekonstruiert. Auf Grundlage dieser geometrischen Informationen können Blutfluss und Adaption der Gefäße in einer Modellrechnung untersucht werden.

Publikationen

- [1] J.V. Hajnal, D.L.G. Hill, D.J. Hawkes: *Medical Image Registration*. Boca Raton: CRC Press, 2001
- [2] H. Lamecker, T. Lange und M. Seebaß: *Erzeugung statistischer 3D-Formmodelle zur Segmentierung medizinischer Bilddaten*. In: Wittenberg, T. et al. (Hrsg.): *Bildverarbeitung für die Medizin (BMV)*, Springer, S. 398–403 (2003)
- [3] H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß, S. Eulenstein, M. Westerhoff und H.-C. Hege: *Automatic Segmentation of the Liver for the Preoperative Planning of Resections*. In: Westwood, J.D. et al. (eds.): *Medicine Meets Virtual Reality 11 (MMVR)*, IOS Press, S. 171–174 (2003)
- [4] T. Lange, H. Lamecker und M. Seebaß: *Ein Softwarepaket für die modellbasierte Segmentierung anatomischer Strukturen*. In: Wittenberg, T. et al. (Hrsg.): *Bildverarbeitung für die Medizin (BMV)*, Springer, S. 111–116 (2003)
- [5] J. Modersitzki: *Numerical Methods for Image Registration*. Oxford: Oxford University Press, 2004
- [6] P. Sapiro, W. Gowin, A. Zaikin, J.S. Thomsen, S. Prohaska, H.-C. Hege, J. Kurths: *Quantification of Changes of Spatial Structure of Human Proximal Tibial Bone Biopsies Using 3D Measures of Complexity*. Accepted for publication by Acta Astronautica.
- [7] M. Seebaß, H. Lamecker, T. Lange, J. Gellermann und P. Wust: *A statistical shape model for segmentation of the pelvic bone*. In: 21th Annual Meeting of the European Society of Hyperthermic Oncology (ESHO), (2003)

2.2.5 Virtuelle Labore

Unter *virtuellen Labors* verstehen wir anwendungsspezifische, integrierte Softwaresysteme, die es erlauben, Probleme aus Medizin, Naturwissenschaften und Technik auf Basis von Daten aus Experiment und Simulation zu lösen. Im englischen Sprachgebrauch ist hierfür die Bezeichnung *Problem Solving Environments (PSE)* üblich. Im folgenden werden exemplarisch drei solche Systeme herausgestellt, an denen im Jahr 2003 gearbeitet wurde, nämlich virtuelle Labore für die Physik, Strömungsmechanik und Neuroanatomie.

Virtuelles Physik-Labor

Bearbeitet von: Werner Benger, Ralf Kähler, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard
Kooperationspartner: Ed Seidel, Louisiana State University (LSU), USA, Denis Pollney, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm, John Shalf, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, San Francisco, Kalifornien, USA, Donna Cox, National Center for Supercomputing Applications (NCSA), Urbana-Champaign, Illinois, USA, Tom Abel, Pennsylvania State University (PSU), USA

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Ziel dieses Projekts ist der Aufbau einer Umgebung zur visuellen Analyse von großen Datensätzen mit Skalar-, Vektor- und Tensorfeldern, vorzugsweise aus numerischen Simulationen zu astrophysikalischen, allgemein-relativistischen Problemen.

VISUALISIERUNG VON AMR-DATEN. Die betrachteten Phänomene sind oft Mehrskalenprobleme, für deren Simulation zunehmend hierarchische, lokal verfeinerte Gitter verwendet werden. Für eine wichtige Teilklasse, die strukturierten (AMR-)Gitter besteht erheblicher Bedarf an entsprechenden Visualisierungsverfahren.

Zur Darstellung von Skalarwerten auf lokal verfeinerten Hexaedergittern wurde ein Algorithmus zur Isoflächen-Erzeugung entwickelt. Das Standardverfahren für Hexaedergitter, der sogenannte ‘Marching Cubes’-Algorithmus, operiert auf Zellbasis und approximiert die Isoflächen der trilinearen Interpolationsfunktion durch lokale Triangulierungen. Bei Anwendung auf lokal verfeinerte Hexaedergitter liefert dieser Ansatz Artefakte an den Grenzen zwischen verschiedenen Auflösungsstufen. Unser Algorithmus vermeidet diese. Er ist insbesondere anwendbar auf Gitter, bei denen sich benachbarte Zellen um beliebig viele Hierarchiestufen unterscheiden können, oder bei denen die Datenwerte an den hängenden Knoten beliebige Werte annehmen können. Abbildung 2.22 zeigt eine Anwendung aus dem Bereich der numerischen Astrophysik.

Ferner wurde ein Raycasting-Algorithmus zum direkten Volume Rendering von strukturierten AMR-Daten entwickelt. Hierzu wird das Datenvolumen in getrennte Bereiche konstanter Auflösungsstufen unterteilt, welche in einer blickpunktabhängigen Reihenfolge bearbeitet werden. Für die numerische Integration der einzelnen Strahlsegmente wird ein adaptives Mehrgitterverfahren verwendet, das eine fehlerkontrollierte Reduzierung der Stützstellenauswertungen erlaubt. Der lokale Fehlerschätzer wurde an das vorliegende Problem angepasst und berücksichtigt insbesondere die akkumulierte Transparenz entlang der Strahlen.

Des Weiteren wurde eine Datenklasse für vektorwertige Gitterfunktionen auf adaptiv verfeinerten Gitter entworfen und implementiert. Durch Einhaltung der Schnittstellen für den Zugriff auf Vektorfelder in *Amira* können auch die anderen, bereits vorhandenen leistungsfähigen Visualisierungsverfahren, wie zum Beispiel beleuchtete Stromlinien oder LIC-Flächen, für diesen Gittertyp genutzt werden.

Mit den für AMR-Gitter entwickelten Verfahren können ‘nicht rekombinierte’ Daten-

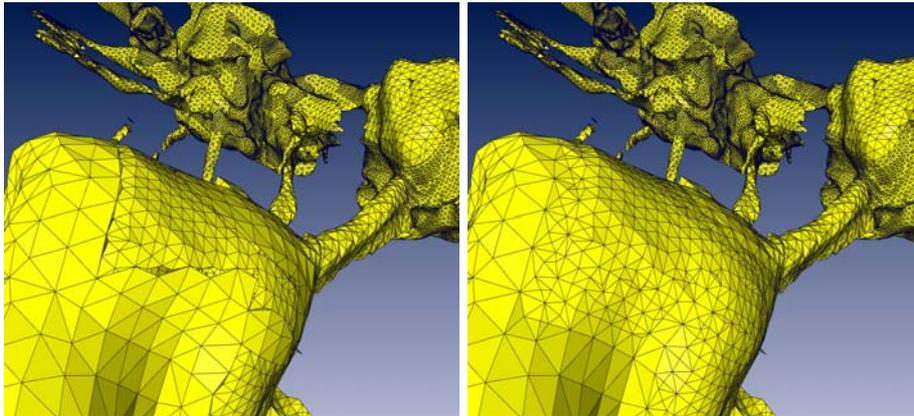


ABBILDUNG 2.22: Isofläche einer Gasdichteverteilung in einer Protogalaxie (Daten auf lokal verfeinertem Hexaedergitter mit ca. 3.000 Untergittern auf insgesamt 10 Verfeinerungsstufen). Links: Nach Anwendung des Standardverfahrens (Marching Cubes) mit deutlichen Artefakten in Form von Löchern in der Fläche. Rechts: Artefaktfreie Fläche bei Verwendung des für diesen Gittertyp neu entwickelten Algorithmus. (Daten von T. Abel, Pennsylvania State University)

sätze z.B. aus parallelen Simulationen direkt - wahlweise auch nur partiell - visualisiert werden. Dies ermöglicht die Darstellung von Datensätzen, die größer sind als der verfügbare Hauptspeicher.

VISUALISIERUNG VON TENSORFELDERN. Verfahren zur grafischen Darstellung von Tensorfeldern sind noch wenig gebräuchlich und bedürfen der Weiterentwicklung; für zeitabhängige Tensorfelder existieren bislang praktisch keine Darstellungsverfahren. Es wurde die neue Visualisierungstechnik der ‘Tensor-Splats’ entwickelt [2], die sich als nützlich in verschiedenen Anwendungsbereichen erwiesen hat. Die Methode liefert einen schnellen Überblick für 2D-Schnitte wie auch für 3D-Volumina.

Abbildung 2.23 zeigt die Anwendung dieser Visualisierungsmethode auf Bilddaten eines menschlichen Hirns, die mit Diffusion Tensor Imaging (DTI), einem speziellen MRT-Verfahren, gewonnen wurden. Dieses Bildgebungsverfahren läßt degenerative Prozesse (z.B. Morbus Alzheimer) bereits in frühen Stadien erkennen und hilft, die Wirksamkeit von neuen Behandlungsstrategien zu bewerten.

Im Kontext der allgemeinen Relativitätstheorie tritt die Problematik auf, dass aufgrund der Koordinatenfreiheit der Zeitkoordinate die räumliche Projektion eines vierdimensionalen (z.B. metrischen) Tensorfeldes nicht eindeutig festgelegt ist. Abbildung 2.24 demonstriert diese Situation anhand der Raumzeit eines rotierenden schwarzen Loches: während im linken Bild zwar die räumliche Geometrie leichter ablesbar ist, ist im rechten Bild die Rotationsstruktur offensichtlicher [1]. Es wird Aufgabe weiterer Forschungsarbeiten sein, beide Eigenschaften gemeinsam sichtbar zu machen.

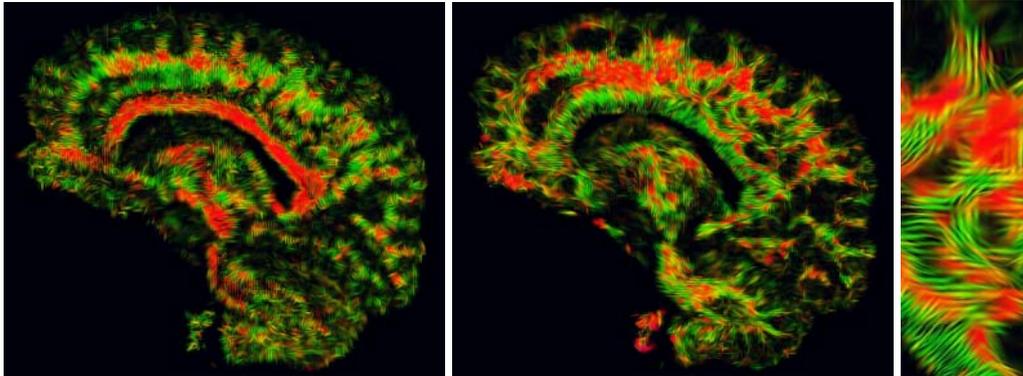


ABBILDUNG 2.23: Visualisierung von DTI-Daten eines menschlichen Gehirns. Die Daten geben Auskunft über die Diffusionsmöglichkeit von Wasser, und damit auch über den Zustand von Nervenfasern. Darstellung des Diffusionstensors selbst (links) sowie des dazu inversen Tensors (Mitte) mit Ausschnittvergrößerung (rechts). Klar erkennbar sind die Bereiche, in denen die Flüssigkeit in nur einer Richtung oder einer Ebene fließen kann.

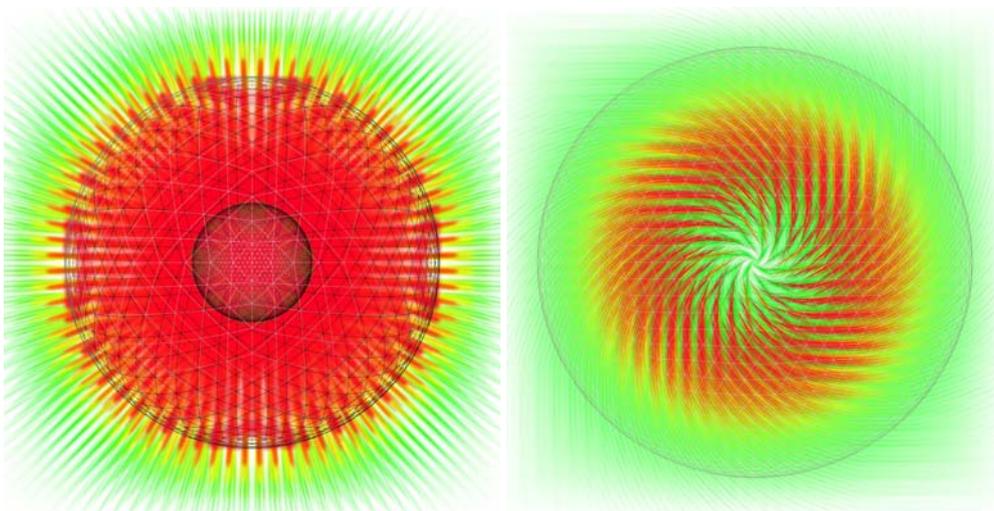


ABBILDUNG 2.24: Die Raumzeit eines rotierenden schwarzen Loches, dargestellt mittels der Tensor-Splat-Visualisierungstechnik – links in sogenannten Boyer-Lindquist-Koordinaten, rechts in Kerr-Schild-Koordinaten.

Die Darstellung von Daten stößt zumeist an die primär praktische Hürde des Daten- bzw. Dateiformates, da es derzeit noch keinen Standard für z.B. Tensorfelder auf dreidimensionalen Gittern gibt. Daher wurde die eigenständige die 'F5'-Softwarebibliothek, eine Implementierung des Faserbündel-Datenmodelles auf Basis des HDF5-Datenformates, weiter entwickelt. Für das numerische Simulationsprogramm CACTUS wurden Ausgaberroutinen für uniforme und adaptiv verfeinerte Daten implementiert. Der Übergang von einer Sammlung einzelner Datenblöcke aus einem gebietszerlegten uniformen Datensatzes zu der eines AMR-Datensatzes ist hierbei fließend. Mithilfe des HDF5-Streaming-Virtual File Drivers ist auch das Live-Streaming von Daten aus einer laufenden numerischen Simulation mittels http-Protokoll möglich, wobei vom Visualisierungssystem nur die jeweils gerade gewünschten Daten in Form einer URL aus der Simulation angefordert werden.

Von der National Science Foundation wurde 2003 in Zusammenarbeit mit dem Science Magazin ein Visualisierungswettbewerb ausgeschrieben. Die beiden Beiträge aus dem ZIB, die Videos "Tackling the Riddles of Gravity" und "Formation of the First Stars in the Universe" [3, 4] und erreichten dabei Plätze unter den zehn weltweit besten in der jeweiligen Kategorie und waren die insgesamt einzigen nicht-amerikanischen Ursprungs.

Virtuelles Strömungslabor

Bearbeitet von: Tino Weinkauff, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Bernd R. Noack, Markus Schatz, Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik (HFI), TU Berlin); Holger Theisel, Hans-Peter Seidel (Max-Planck-Institut für Informatik Saarbrücken (MPII)); George Haller (Department of Mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology (MIT), USA)

Im Rahmen dieser Aktivität entsteht ein virtuelles Labor zur Analyse von 3D-Strömungsfeldern. Schwerpunkt ist die Entwicklung von Methoden zur Extraktion und Analyse von strömungsphysikalisch interessanten Merkmalen in zeitabhängigen Strömungen.

Bei der Simulation solcher Strömungen fallen sehr große Datenmengen an. Eine Reduktion dieser Strömungen auf ihre wesentlichen, bestimmenden Eigenschaften durch eine merkmalsbasierte Analyse und eine Darstellung der extrahierten Merkmale verringert die visuelle Komplexität, erleichtert die Erfassbarkeit und verbessert das Verständnis der physikalischen Prozesse in der Strömung. Hinzu kommt die eine interaktive Darstellbarkeit auch bei großen Datenmengen und die Möglichkeit, Strömungen auf Basis ihrer Merkmale zu vergleichen.

Im Jahr 2003 wurden Methoden zur topologischen Analyse in das virtuelle Strömungslabor integriert. Dabei handelt es sich insbesondere um die Extraktion von kritischen Punkten und davon ausgehenden Separatrizen. Abbildung 2.25 (links) zeigt ein derartiges topologisches Skelett am Beispiel einer Zylindernachlaufströmung. Im Rahmen

dieser Arbeiten wurde gemeinsam mit H. Theisel die neue Methode der Sattelkonnektoren zur vereinfachten Darstellung von topologischen Skeletten entwickelt [12]. Sattelkonnektoren sind Stromlinien, die zwei Sattelpunkte ausgehend von den jeweiligen Sattellebenen miteinander verbinden (Abbildung 2.25 (rechts)) und werden durch den Schnitt von zwei Separationsflächen definiert. Ein verstärktes Auftreten von Sattelkonnektoren weist auf gute Mischungseigenschaften der Strömung hin.

Mit Mitarbeitern des HFI wurden Vorarbeiten für ein gemeinsames Teilprojekt im Sfb 557 („Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“) geleistet und ein Antrag erarbeitet. Das beantragte Teilprojekt („Simulation und merkmalsbasierte Analyse von Hochauftriebskonfigurationen mit aktiver Strömungskontrolle“) soll in Zusammenarbeit mit der AG Thiele durchgeführt werden. Die Erkenntnisse aus der Analyse sollen insbesondere ein besseres physikalisches Verständnis des nur punktuell abtastbaren hochdimensionalen Parameterraums ermöglichen. Die enge Kopplung von Simulation und visuell gestützter Analyse soll auch die Praxisbezogenheit der entwickelten Methoden sicher stellen. Auch zu anderen Teilprojekten des Sfb besteht eine enge Verbindung. So werden die analytischen Methoden auch in der AG Noack Verwendung finden. Auf dem Gebiet der Mischungsanalyse wurde eine Kooperation mit G. Haller initiiert.

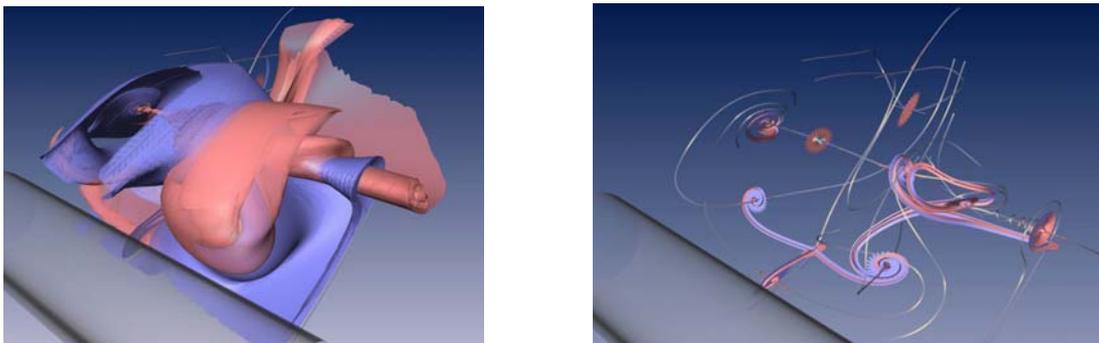


ABBILDUNG 2.25: Topologie einer Zylindernachlaufströmung. *Links*: Durch die Darstellung der Separationsflächen ergibt sich eine hohe visuelle Komplexität. *Rechts*: Die Reduktion des topologischen Skeletts durch Sattelkonnektoren ergibt eine übersichtlichere Darstellung.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Ulrich Nowak, Alexander Maye, Malte Westerhoff, David Pluntze, N. Sachnov

Kooperationspartner: Martin Heisenberg (Institut für Genetik und Neurobiologie – Biozentrum, Universität Würzburg), Randolph Menzel (Neurobiologie, FU Berlin), Reinhard Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg, Konrad-Zuse-Fellow)

Förderung: BMBF, Verbundprojekt "Virtual Brain"

WEITERENTWICKLUNG DES STANDARDGehirNS. Die bisher im Projekt entwickelten Methoden erlauben eine schnelle und komfortable Visualisierung von Mikroskopbilddaten, die Erstellung dreidimensionaler geometrischer Modelle aus diesen Daten und deren quantitative und qualitative Analyse. Ein Schwerpunkt der Arbeit im Berichtszeitraum war es, Daten aus unterschiedlichen neuroanatomischen Untersuchungen in Verbindung zu setzen und vergleichbar zu machen. Als gemeinsame Referenz und integrierender Rahmen dienen dabei die Standardgehirne (Gehirnatlanten) der jeweiligen Tierarten, die in zurückliegenden Perioden entwickelt wurden [9].

Die Integration von Daten erfolgt durch Registrierung der Datensätze im Gehirnatlas. Dazu wird der Datensatz anhand von Färbungen größerer Gehirnstrukturen mittels einer affinen Transformationen zunächst in grobe Übereinstimmung mit den Koordinaten des Atlases gebracht. Eine voxelgenaue Abbildung wird anschließend durch eine elastische Transformation (FFD-Bildregistrierung, vgl. S. 54) erreicht. Die Gesamttransformation wird auf die untersuchten Strukturen, wie z.B. einzelne Neuronen oder Trakte, angewendet. Bei der Registrierung sind nur solche Transformationen zuzulassen, die der interindividuellen Variation von Gehirnen und Verzerrungen bei der Präparation und Bildaufnahme entsprechen. Die entwickelten Registrierungsverfahren (vgl. S. 54) erlauben dieses durch Einsatz einer Reihe von Maßnahmen.

Die gemeinsame Darstellung des resultierenden Deformationsfeldes mit den Bilddaten ermöglicht die Kontrolle der berechneten Abbildung, ist aber auch für die Untersuchung morphologischer Unterschiede zwischen individuellen Gehirnen interessant. Aussagekräftige Visualisierungsmethoden sind deformierte Gitter, Vektorfelder oder Strömungslinien. Eine neuartige Methode zur Inspektion wurde durch den Einsatz der Tensorfeldvisualisierung (vgl. S. 59) geschaffen. Die Darstellung des durch das Verschiebungsfeld induzierten metrischen Tensors erleichtert das Auffinden sowohl interessanter als auch problematischer Regionen im Verschiebungsfeld (siehe Abbildung 2.26).

In Kooperation mit Arbeitsgruppen der Neurobiologie an der Universität Würzburg bzw. an der FU Berlin wurden die entwickelten Methoden auf mehrere Datensätze aus den Gehirnen der Fruchtfliege (*drosophila*) bzw. Honigbiene (*apis mellifera*) angewendet. Bei der Fliege wurden Daten aus Gal4-Expressionsbildern in den Gehirnatlas integriert. In den Gehirnatlas der Biene wurden das VUMlb2-Neuron, ein Projektionsneuron und die olfaktorischen Trakte aufgenommen.

NUMERISCHE SIMULATIONEN. Den zweiten Schwerpunkt der Arbeit am Projekt bildete die Rekonstruktion der Funktion einzelner Neuronen. Aus den geometrischen Daten rekonstruierter Neuronen und den zugehörigen elektrophysiologischen Parametern wurden funktionelle Modelle vom Hodgkin-Huxley-Typ erzeugt. Ziel der Kooperation mit der AG Menzel ist die experimentelle Untersuchung, mathematische Modellierung und Simulation der Duftkodierung im Bienenhirn.

Fortgeführt wurde die Arbeiten zur Entwicklung und Implementierung eines Softwa-

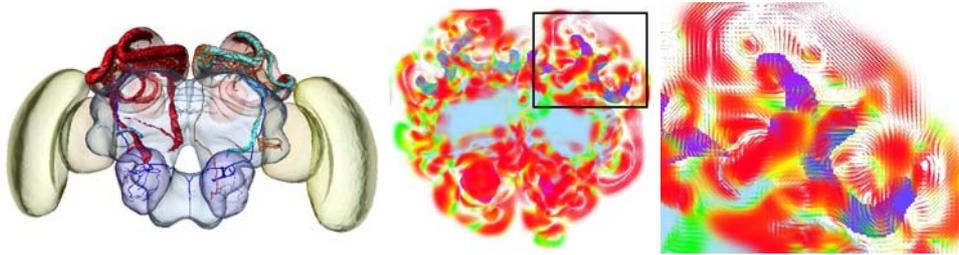


ABBILDUNG 2.26: *Links*: Gehirnatlas der Honigbiene (transparent) mit olfaktorischen Trakten (rot und cyan), einem Projektionsneuron (orange) und dem VUM1b2-Neuron (blau). *Mitte*: Tensorfeldvisualisierung des Deformationsfeldes, das das Gehirn, in dem das VUM1b2-Neuron gefärbt wurde, auf den Gehirnatlas abbildet. Unterlegt ist das zugehörige Schichtbild aus dem Labelfeld des Gehirnatlasses, das die für die Registrierung benutzten Strukturen zeigt. Transparente Bereiche zeigen an, wo keine Deformation stattgefunden hat (der Fall in zentralen Regionen großer Strukturen, wie z.B. dem Protocerebrum), „Strudel“ zeigen Stellen mit lokalen Extrema der Deformation an. *Rechts*: Vergrößerter Ausschnitt.

remoduls, das die Eingabe von geometrisch komplexen Neuronen, ihre Modellierung mit oft genutzten Membranmodellen und ihre Kompartimentierung erleichtern soll.

Im Rahmen einer abgeschlossenen Diplomarbeit (TFH Berlin) wurde in einem ersten Schritt ein geeignetes Interface zum Integrationsverfahren LIMEX entwickelt, das die Eingabe von neuronalen Baumstrukturen mit entsprechender Geometriebeschreibung erlaubt. Als Membranmodelle standen passives Kabel und Hodgkin-Huxley zur Verfügung. Dieses Programmpaket wurde weiter ausgebaut und es stehen inzwischen 7 gängige Membranmodelle zur Verfügung. Weitere Modelle können in einfacher Weise hinzugefügt werden. Als Integrator kann jetzt auch auf die Sparse-Version von LIMEX zugegriffen werden, so dass auch sehr fein aufgelöste Modelle effizient und robust simuliert werden können. Erste Schritte in Richtung einer Kopplung mit Amira wurden erfolgreich unternommen. Die Ergebnisse der Simulationen können dadurch auf der tatsächlichen 3D-Geometrie des rekonstruierten Neurons dargestellt werden (siehe Abbildung 2.27).

Neben diesen Aktivitäten wurden erste Schritte in Richtung Netzwerksimulationen unternommen. Es wurden einfache feed-forward-Netze implementiert und untersucht, insbesondere Fragen zur Lernfähigkeit und -geschwindigkeit. Daneben wurde mit der Implementierung und Untersuchung von sogenannten Simple Spiking Neurons und einfachen Integrate-and-Fire-Modellen begonnen.

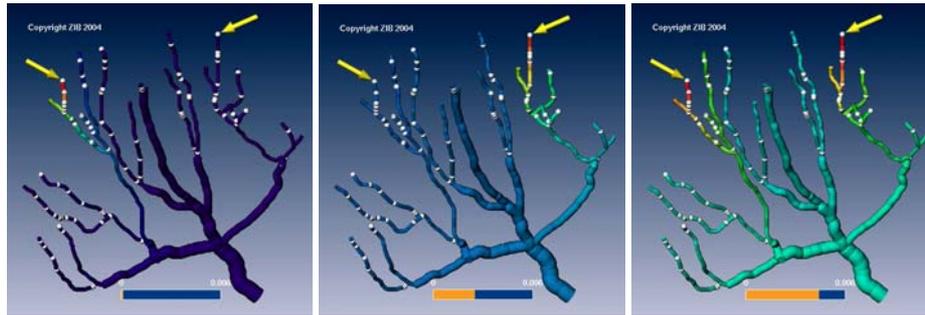


ABBILDUNG 2.27: Rekonstruktion des vereinfachten Dendritenbaums eines PE1-Neurons mit synaptischen Eingängen. Gezeigt sind drei Schnappschüsse der Signalausbreitung, wenn die beiden durch Pfeile gekennzeichneten Synapsen je einzeln und gemeinsam stimuliert werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

3D-Visualisierungssystem Amira (Detlev Stalling, Malte Zöckler, Hans-Christian Hege; Kooperation: Indeed – Visual Concepts GmbH, Berlin; TGS SA, Bordeaux, Frankreich und TGS Inc., San Diego, USA)

Das 3D-Visualisierungssystem Amira bildet seit einigen Jahren erfolgreich die Softwarebasis, auf der fast alle Anwendungsprojekte in der Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung aufbauen. Amira wird in einer kommerziellen Version von der Spin-Off Firma *Indeed – Visual Concepts GmbH* in Zusammenarbeit mit dem ZIB weiterentwickelt, und von der Firma TGS mit Sitz in Bordeaux und San Diego weltweit vermarktet. Diese 1999 begonnene Zusammenarbeit wurde im Jahr 2003 erfolgreich weitergeführt.

Inhaltlich stand 2003 die Entwicklung der Programmversion Amira 3.1 im Vordergrund. Auf der einen Seite wurden neue Funktionen integriert, z.B. ein Modul zur affinen multi-modalen Registrierung, ein Tool zum Erzeugen und Abspielen von hochauflösenden digitalen Stereofilmen, oder ein Modul zum Darstellen angeschnittener Ansichten von Flächenmodellen. Auf der anderen Seite wurden fast alle existierende Module überarbeitet und insbesondere hinsichtlich ihrer Skriptanbindung und Dokumentation verbessert. Als neue Hardware-Plattform wird nunmehr Itanium2 unterstützt (64-bit Linux). Für weitere Informationen sei auf die Webseite www.amiravis.com verwiesen.

Einen Meilenstein für den Einsatz von Amira im Bereich Virtual Reality stellte die Fertigstellung einer Cluster-Version von AmiraVR dar. Mit dieser Version kann Amira auf einem Grafik-Cluster betrieben werden. Jeder Knoten eines solchen Clusters erzeugt dabei ein Teilbild für ein Multi-Wall Display-System, zum Beispiel einer Holobench(TM) oder Cave(TM). Technisch wurde dabei ein Master-Slave Ansatz gewählt, bei dem eine Amira-Instanz auf einem Master-Knoten sich mit weiteren Amira-

Instanzen auf den Slave-Knoten synchronisiert. Benutzereingaben werden an alle Instanzen weitergeleitet, so dass diese sich immer in exakt dem gleichen Zustand befinden. Lediglich die Perspektive für die 3D-Darstellung ist eine andere.

Die Cluster-Version von AmiraVR ist u.a. im immersiven 3-Wand-Displaysystem (PORTAL) des DFG-Forschungszentrums “Mathematik für Schlüsseltechnologien” an der TU Berlin seit Dezember 2003 im Einsatz.

Landschaftsvisualisierung (Philip Paar, Andreas Wendleder, Liviu Coconu, Hans-Christian Hege; Kooperation: Armin Werner, Wieland Röhrich (Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF), Müncheberg); Oliver Deussen, Carsten Colditz (Institut für Computergrafik und Medieninformatik, Universität Konstanz); Jürgen Döllner, Konstantin Baumann und Henrik Buchholz (Hasso-Plattner-Institut für Softwaresystemtechnik, Potsdam); Jörg Rekitke (Lehrstuhl für Städtebau und Landesplanung, Fakultät für Architektur, RWTH Aachen); Adrian Herwig (freier Landschaftsarchitekt, Stechau); Förderung: Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU))



ABBILDUNG 2.28: Echtzeitdarstellung einer nachmodellierten 3D-Landschaftsszene (aus einem Gebiet in der Uckermark) im Lenné3D-Player. Die Zahl der dargestellten Pflanzen wurde verzehnfacht, in dieser Szene befinden sich ca. 3 Millionen Pflanzen.

Lenné3D ist ein Forschungsverbundvorhaben in den Bereichen Computergrafik, Landschaftsmodellierung und Landschaftsvisualisierung. Seit Mai 2002 wird ein System

zur interaktiven 3D-Landschaftsvisualisierung entwickelt. Mit dem Software-System Lenné3D sollen Bürgerbeteiligungen und Entscheidungsprozesse in der Landschaftsplanung unterstützt werden [13].

Es wurde neue Level-of-Detail-Techniken entwickelt und die vorhandenen wurden verfeinert, so dass die interaktiv darstellbare Pflanzendichte um fast eine Größenordnung gesteigert werden konnte. Zum Zuge kommen dabei eine Kombination von Techniken: punkt- und linienbasiertes Rendering von Pflanzen im mittleren Entfernungsbereich, Billboards für weit entfernte Pflanzen sowie sogenannte Farmaps.

Da die Zahl der in der Szene abgebildeten grafischen Primitive die Pixelanzahl auf dem Schirm um Größenordnungen überschreitet, ist klar, dass viele Objekte durch Punkte und Linien ausreichend gut approximiert werden. An bildbasierten Verfahren wurden Billboards und Multi-Layered-Images (MLI) implementiert, die das Rendern entfernter Pflanzen beschleunigen; Billboards sind einfache 2D-Repräsentierungen, die für weit entfernte Pflanzen ohne visuelle Einbußen verwendet werden können. MLIs bieten im Vergleich zu Billboards eine winkelabhängige Darstellung, so dass im Vergleich zu Billboards geringere Betrachtungsfehler entstehen. Zur Unterstützung des Terrain-Rendering wurden die sogenannten Farmaps entwickelt: Texturen, die vorab von verschiedenen Standpunkten aus generiert werden und dann beim Echtzeitrendering auf das Terrain projiziert werden und so die Bildqualität der dargestellten Landschaft verbessern. Für die Visualisierung der Pflanzen wurde ein spezieller Shader implementiert, der Pflanzen unter Nutzung von Grafikhardware transluzent darstellt und so die Qualität der Darstellung erheblich verbessert.

Auch Stereovision wurde mit dem Lenné3D-Player möglich: Zwei Instanzen des Players visualisieren die Landschaft jeweils für einen Sichtpunkt, der einem Auge entspricht. Die erzeugten Bilder werden dem Betrachter mit einem der bekannten Displayverfahren (Anaglyphen, Polarisationsbrille oder Shutterbrille) zugänglich gemacht.

Zur gemeinsamen Nutzung des Karteneditors des Hasso-Plattner-Instituts mit dem am ZIB entwickelten Lenné3D-Player wurde eine Netzwerkkopplung implementiert. Diese erlaubt das gemeinsame, synchrone Navigieren in einer Szene mit beiden Softwaresystemen.

Tangible Interfaces zur Unterstützung interaktiver Visualisierungen (Brygg Ullmer, Werner Benger, Stefan Zachow, Andrei Hutanu; Kooperation: Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut), Golm/Potsdam; Förderung: Europäische Union, MPG)

Moderne grafische Benutzerschnittstellen (GUIs) basieren auf einer standardisierten Kernfunktionalität und allgemein anerkannten Konventionen zur Bedienung von Software. Diese umfassen Methoden zum Starten und Stoppen von Anwendungen, zum Laden und Speichern von Daten und zur Veränderung von Parametern. Für VR- und AR-Systeme, die zum Teil auch kombiniert werden mit Videokonferenz- und Virtuelle-



ABBILDUNG 2.29: Gebrauch der neuen Schnittstellen zur Erleichterung der Interaktion in einem immersiven Displaysystem.

Präsenzsystemen, sind die Benutzerschnittstellen oft inkonsistent, Standards und Bedienungskonventionen fehlen. In dem Projekt werden Konzepte sowie Hard- und Software entwickelt, die diese Beschränkungen überwinden sollen.

Die Benutzerschnittstelle basiert auf einer Kombination von vier modularen Geräten, in Kombination mit einfachen physischen Objekten (Karten, Rädern und Blöcken), die über daran befestigte RFID-Tags gelesen und beschrieben werden können (Abbildung 2.29; [6, 5, 6]). Die Schnittstelle ist so konzipiert, dass sie sowohl Anfängern wie auch fortgeschrittenen Benutzern erlaubt, grundlegende Funktionen auf konsistente Weise aufzurufen und zu steuern. Standardfunktionen, die in vielen Anwendungsbereichen verwendet werden, sind z.B. das Platzieren von Objekten und Fenstern, das Laden, Speichern und Verknüpfen von Daten, oder die Definition von Werten in mehrdimensionalen Parameterräumen.

Die neuen Schnittstellen (Abbildung 2.29) und Bedienkonzepte wurden in Verbindung mit der 3D-Visualisierungsumgebung AMIRAVR entwickelt und erprobt. Sie bieten eine Unterstützung für die Arbeitsgruppen des GridLab (siehe Seite 70); des Weiteren wird mit Astrophysikern und Chirurgen zusammengearbeitet, die daran interessiert sind, diese in ihrer täglichen Forschungsarbeit bzw. klinischen Umgebung zu verwenden.

CoDiSP – Collaborative Distributed Surgery Planning (André Merzky, Stefan Zachow, Daniel Baum, Andrei Hutanu, Brygg Ullmer, Hans-Christian Hege; Kooperation: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Kantonsspital Basel, Klinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Schweiz sowie Center of Advanced Cranio-Maxillofacial Surgery am Klinikum rechts der Isar, Technische Universität München); Förderung: Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (DFN))

Im CoDiSP-Projekt wurden die notwendigen Voraussetzungen geschaffen, um das in

Abschnitt 2.2.3 beschriebene System zur Planung knochenverlagernder chirurgischer Eingriffe *netzverteilt* und *kooperativ* nutzen zu können. Das System wurde auf VNC [14] aufgebaut, so dass statt mehreren verteilten, synchronisierten Instanzen nur eine Instanz der Planungssoftware notwendig ist, die sich plattformunabhängig sowie mit minimalen Software-Anforderungen auf der externen Teilnehmerseite netzverteilt nutzen läßt. Teilnehmer können sich an- und abmelden und je nach Teilnehmerstatus aktiv oder passiv an der Planung beteiligen. Planungsdaten werden dabei via GridFTP unter Verwendung von (Globus GSI oder SSL) sicher in das Planungssystem geladen. Ein HDF5-Interface ermöglicht es zudem, großvolumige Datensätze (250 MB und mehr) selektiv in einer den Anforderungen entsprechenden, reduzierten Auflösung und planungsrelevante Teilbereiche in ihrer vollen Auflösung zu laden. Eine Präsentation des verteilten Planungssystems erfolgte beim DFN *Future Talk* auf der CeBit 2003 in Hannover.

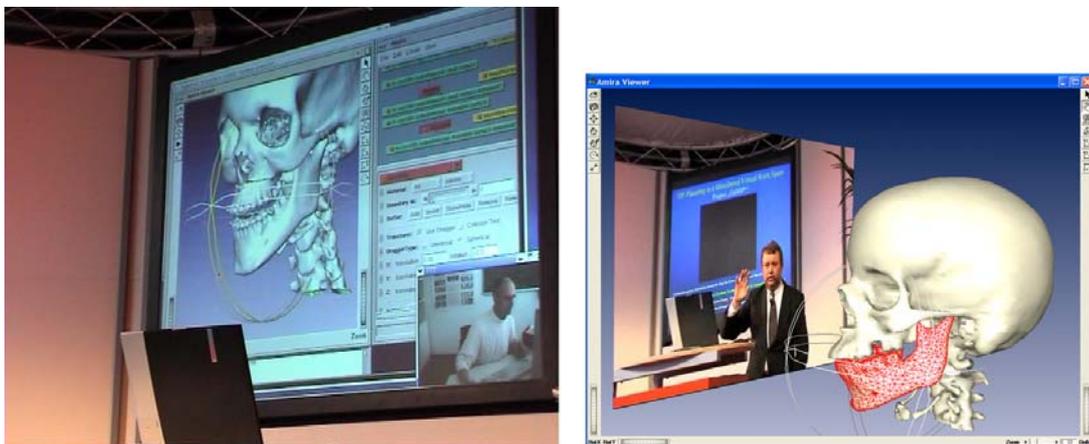


ABBILDUNG 2.30: *Links*: Planungsansicht mit Videokonferenz (CeBit 2003).
Rechts: Lokale Einbettung der Videokonferenz in die Planungsansicht.

Die Einbindung der Videokonferenz in die Planungsansicht wurde erfolgreich realisiert. Für einen praktischen Einsatz muss die Performance noch verbessert werden. Videodaten werden dabei direkt von einer *Frame-Grabber*-Karte übernommen und können frei platzierbar in der Planungsansicht bzw. in einem Extrafenster angezeigt werden. Die Kommunikation bei einer gemeinsamen Planung setzt nicht mehr mehrere getrennte Monitore voraus und wird dadurch ergonomischer. Weiterhin kann die gesamte Planungsansicht, inklusive der Videotexturen als Live-Videodatenstrom vom Planungssystem exportiert werden, so dass eine Betrachtung der Ergebnisse auf jedem handelsüblichen Computer mit einem RTSP-Klienten (Apple Quicktime Player, mplayer etc.) und Netzwerkanschluss möglich ist. Durch den Videoexport lassen sich die Planungsdaten sowohl zu Schulungs- bzw. Ausbildungszwecken als auch zur erweiterten Patientenaufklärung nutzen.

GridLab – A Grid Application Toolkit and Testbed (Andrei Hutanu, Brygg Ullmer, Andre Merzky, Stefan Zwierlein; Kooperation: Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI), Golm/Potsdam; Poznan Supercomputing and Networking Center, PSNC, Poznan, Poland; Masaryk University, Brno, Czech Republic; MTA SZTAKI, Budapest, Hungary; Vrije Universiteit, VU, Amsterdam, The Netherlands; University of Lecce, ISUFI/HPCC, Lecce, Italy; Cardiff University, Cardiff, Wales; Förderung: Europäische Union)

Im Projekt GridLab werden Grid-basierte Middleware und Services unter anwendungsorientierten Gesichtspunkten entwickelt. Als eine der 14 am Projekt beteiligten Einrichtungen arbeitet die Abteilung “Wissenschaftliche Visualisierung” zusammen mit der Abteilung “Computer Science Research” des ZIB an der Entwicklung von Grid-fähigen Daten-Management- und Visualisierungstechniken sowie -diensten.

VISUALISIERUNG VON ENTFERNTEN DATEN MIT AMIRA. Es wurde ein auf GridFTP basierender Datenservice entwickelt, der effizienten Zugriff auf entfernte Dateien im HDF5-Format ermöglicht [10]. Der Service läuft auf dem Rechner, der die HDF5-Daten beherbergt. Er stellt zwei Zugriffsmethoden zur Verfügung, die aus Anforderungserfordernissen abgeleitet wurden. Die erste Methode ermöglicht die Extraktion von Metadaten – und ist nahezu alle anderen HDF5-Operationen essentiell. Die Metadaten (Informationen über die Daten) enthalten alle Datenattribute und alle Informationen über die in der Datei enthaltenen Datensätze, und stellen normalerweise nur einen Bruchteil der eigentlichen Dateigröße dar. Ein normaler HDF5-Reader verwendet diese Metadaten dann während allen weiteren Operationen auf der Datei. Die zweite Methode ermöglicht das Lesen der Datensätze der Datei, und unterstützt dabei die Angabe von Hyperslabs (HDF5-spezifische Selektoren für die Daten). Der HDF5-Service wurde in eine Anzahl von Amira-Datenmodulen integriert, und ermöglicht damit die Visualisierung großer und entfernter Datensätze mittels einer breiten Palette von Amira-Visualisierungsmodulen [10].

DATEIDIENSTE, GRID APPLICATION TOOLKIT. Die im Jahr 2002 begonnenen Entwicklungen von dateibasierten Diensten wurden fortgesetzt und deren Funktionalität u.A. um folgende Punkte erweitert:

- asynchroner Third-Party Transfermodus für Dateien
- adaptive Optimierung von TCP-Parametern unter Ausnutzung der Netzwerk-Messungen des ‘Adaptive-Service’ des GridLab-Projektes
- Ausnutzung paralleler Streams beim Transfer von Dateien

Sowohl der File-Movement-Service als auch der File-Browsing-Service wurden als Open Source unter (<http://www.gridlab.org/>) zum Herunterladen bereitgestellt. Beide Services werden von anderen Diensten und anderen Partnern im GridLab-Projekt genutzt und stellen einen Kernbestandteil der EU-weiten Infrastruktur des Projektes dar.

Das ‘Grid Application Toolkit’ (GAT) stellt den zentralen Teil der im GridLab-Projekt zu entwickelnden Software dar. Diese Bibliothek wird unter anderem den einfachen Zugriff von Applikationen auf im Grid verfügbare Ressourcen und Daten ermöglichen. Sie stellt auch Methoden zum Zugriff auf entfernte Dateien im Grid zur Verfügung. In diesem Zusammenhang wurde der sog. ‘GAT-Adaptor’ implementiert, der die entsprechende Funktionalität im GAT durch die oben erwähnten Dienste implementiert und nun Bestandteil der offiziellen Distribution von GAT ist.

In Zusammenarbeit mit der ZIB-Abteilung “Computer Science Research” wurde der Remote-Datenzugriffsservice um effiziente Zugriffsmethoden auf beliebigen binären Datenformaten erweitert [11], aufbauend auf dem Konzept der PITFALLS (Processor Indexed Tagged FAmiLy of Line Segments). Die Implementierung dieser Erweiterung ist vergleichbar mit der Implementierung der HDF5-basierten Module zum Datenzugriff des Dienstes. Der neue Dienst wurde erfolgreich in die GridLab-Applikation ‘Triana’ integriert und öffentlich demonstriert [11].

VISUALISIERUNGSSERVICE. Für die Darstellung von Visualisierungsergebnissen auf mobilen Endgeräten (Telephon, PDA) wurde ein Visualisierungsdienst entwickelt und implementiert, der gerätespezifische Charakteristika, insbesondere die niedrige Auflösung berücksichtigt. Ein Prototyp wurde zur Visualisierung von Daten aus Cactus-Simulationen eingesetzt. Der Visualisierungs-Dienst nutzt die zuvor beschriebenen Dienste zum Datenmanagement und Datenzugriff um die in Cactus generierten Daten und simulationsspezifische Parameterdateien einzulesen. Die Parameterdateien können auch zur Spezifikation von Visualisierungsparametern genutzt werden, falls nicht von Voreinstellungen Gebrauch gemacht werden soll.

Die Ergebnisse dieser Operationen werden dem Nutzer über einen Web-Server zur Verfügung gestellt. Dieser Service wurde ebenfalls mit anderen Diensten im Gridlab-Projekt integriert und getestet und in Zusammenarbeit mit dem GridLab-Portal erfolgreich auf dem GGF10 in Berlin demonstriert.

Publikationen

- [1] W. Benger and H.-C. Hege, *Analyzing curved spacetimes with tensor splats*, Proc. 10th Marcel Grossmann Meeting, 2004 (to appear).
- [2] W. Benger and H.-C. Hege, *Tensor splats*, Conference on Visualization and Data Analysis 2004 (Roberts Gröhn Börner Erbacher, Chen, ed.), 2004 (to appear).
- [3] W. Benger and D. Cox, R. Patterson, S. Levy; Support: H. -C. Hege and E. Seidel; Musik: I. Jordan (www.psalteria.at), W. Kapferer, Andreas Schulte (www.schulte-musik.de), O. Skrzypczyk (Exozet Babelsberg); Text: W. Benger, B. Ullmer, C. Brase; Sprecher: Eric Hansen; *Tackling the Riddles of Gravity*, Video zum “Science and Engineering Visualization Challen-

- ge” contest der National Science Foundations und Science Magazine, 2003, <http://www.zib.de/visual/projects/ART>.
- [4] R. Kähler and D. Cox, R. Patterson, S. Levy; Support: H.-C. Hege and E. Seidel and T. Abel; Text: R. Kähler, B. Ullmer; Sprecher: Eric Hansen; *Formation of the First Stars in the Universe*, Video zum “Science and Engineering Visualization Challenge” Wettbewerb der National Science Foundations und Science Magazine, 2003
- [5] B. Ullmer and A. Hutanu and W. Bengler and H.C. Hege, *Emerging tangible interfaces for facilitating collaborative immersive visualizations*, (extended abstract). NSF Lake Tahoe Workshop on Collaborative Virtual Reality and Visualization, October 2003.
- [6] B. Ullmer and H. Ishii and R. Jacob, *Tangible Query Interfaces: Physically Constrained Tokens for Manipulating Database Queries*. Proc. INTERACT’03, Sept. 2003.
- [7] R. Kähler, M. Simon und H.-C. Hege: *Interactive Volume Rendering of Large Data Sets Using Adaptive Mesh Refinement Hierarchies*. In: IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 9(3), S. 341–351 (2003)
- [8] R. Kähler und H.-C. Hege: *Visualization of Time-Dependent Adaptive Mesh Refinement Data*. Report 03–16, ZIB, 2003.
- [9] K. Rein and M. Zöckler and M.T. Mader and C. Grübel and M. Heisenberg: *The Drosophila Standard Brain*, Current Biology (12), pp. 227–231, 2002
- [10] H.-C. Hege, A. Hutanu, R. Kähler, A. Merzky, T. Radke, E. Seidel and B. Ullmer: *Progressive Retrieval and Hierarchical Visualization of Large Remote Data*. In: Proceedings of the 2003 Workshop on Adaptive Grid Middleware, S. 60–72 (September 2003)
- [11] T. Schütt, A. Merzky, A. Hutanu and F. Schintke: *Remote Partial File Access Using Compact Pattern Descriptions*. IEEE/ACM Intl. Symp. on Cluster Computing and the Grid - CCGrid2004, April 2004
- [12] H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, and H.-P. Seidel. *Saddle connectors - an approach to visualizing the topological skeleton of complex 3D vector fields*. In Proc. IEEE Visualization 2003, 225–232, Seattle, October 2003.
- [13] P. Paar, J. Rekitke: *Geplante Landschaft wie sie der Spaziergänger kennt. Lenné3D: Entwicklung eines Programms zur Landschaftsvisualisierung*. In: Stadt+Grün, Patzer, Berlin-Hannover (2003)
- [14] T. Richardson, Q. Stafford-Fraser, K.R. Wood, A Hopper: *Virtual Network Computing*. IEEE Internet Computing 2(1), pp. 33-38, 1998.

2.2.6 Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung

Nichtlineare Ansätze verfolgen wir zur Steuerung komplexer Systeme mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Bei den Innere-Punkte-Methoden für Optimalsteuerungsprobleme und im Projekt zur Steuerung der Lastverteilung in Gasnetzen ist die adäquate Behandlung der Differentialgleichungen wesentlich. Charakteristisch für das letztgenannte Projekt sowie für das Projekt mit den Berliner Wasserbetrieben ist die zusätzliche Komplexität, die das jeweilige Versorgungsnetz verursacht.

Die Lösung der nichtlinearen Modelle ist mit hohem Rechenaufwand verbunden. Daher kommt der Entwicklung effizienter Algorithmen, die innerhalb der gegebenen Problemklasse möglichst gute Strukturnutzung erlauben, große Bedeutung zu. Bei der Optimierung in Versorgungsnetzen erreichen wir dies durch rekursive Algorithmen bzgl. der Zeit, die mit Sparse-Solvern zur Ausnutzung der Netztopologie gekoppelt werden, bei den Innere-Punkte-Methoden durch einen inexakten Newton-Pfadverfolgungsalgorithmus mit adaptiver Mehrgitter-Methode in der innersten Schleife.

Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard, Anton Schiela, Tobias Gänzler

Kooperationspartner: Fredi Tröltzsch, Uwe Prüfert (TU Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1

Die in den letzten Jahren entwickelte Innere-Punkte-Methode im Funktionenraum wurde sowohl analytisch eingehender untersucht als auch algorithmisch vorangetrieben. Zunächst konnte die Konvergenztheorie vereinfacht und erweitert werden, so daß jetzt gitterunabhängige lineare Konvergenz auch in allgemeinen Situationen gesichert ist [7]. Der Schwerpunkt verschiebt sich dabei zunehmend zu partiellen elliptischen Differentialgleichungen, auf die die Konvergenztheorie im wesentlichen übertragen werden konnte. Nach wie vor entziehen sich jedoch Zustandsbeschränkungen und Bang-Bang-Probleme weitgehend einer analytischen Behandlung. Hier wurden mit der Verwendung geeignet skalierten Normen erste Ergebnisse erzielt.

In ersten Versuchen wurde die numerische Eignung des Verfahrens für elliptische Differentialgleichungen gezeigt. Dabei lag der Schwerpunkt der Betrachtung zunächst auf der Schrittweitensteuerung der Innere-Punkte-Homotopie. In der zweiten Jahreshälfte wurde mit der Implementierung der funktionsraumbasierten Methode in das Programmpaket KASKADE begonnen, wobei besonderes Augenmerk auf der Verwendung adaptiver Gitter liegt.

Asymptotische Gitterunabhängigkeit des Newtonverfahrens

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard, Anton Schiela

Förderung: DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1

Asymptotische Gitterunabhängigkeit bezeichnet das im wesentlichen gleiche Konver-

genzverhalten des Newtonverfahrens auf allen hinreichend feinen Diskretisierungen eines kontinuierlichen Problems. Im Rahmen der Arbeit an der Monographie [5] wurden Unzulänglichkeiten früherer Arbeiten untersucht, die eine Anwendung dieser Sätze auf konkrete Probleme erschweren. Dies betrifft insbesondere die Annahme, daß die Lösung „hinreichend glatt“ ist, was die Gültigkeit der Aussagen auf eine a priori nicht klar beschriebene Teilmenge der zu lösenden Probleme einschränkte.

In diesem Projekt wurde eine konzeptionell wesentlich einfachere Theorie der Gitterunabhängigkeit entwickelt, die auf deutlich schwächeren und besser verifizierbaren Annahmen basiert [6]. Die Arbeit beruht ausschließlich auf Größen, die in natürlicher Weise in diskretisierten Newtonverfahren auftreten. Der dabei verwendete Begriffsrahmen der inexakten Newtonverfahren ermöglicht eine besonders anschauliche Behandlung der auftretenden Diskretisierungs- und Iterationsfehler. Wesentliches Hilfsmittel war ein neues nichtlineares Störungslemma, das wir, in Anklang an [4], „Lady Windermere’s fan“ nannten (Abbildung 2.31).

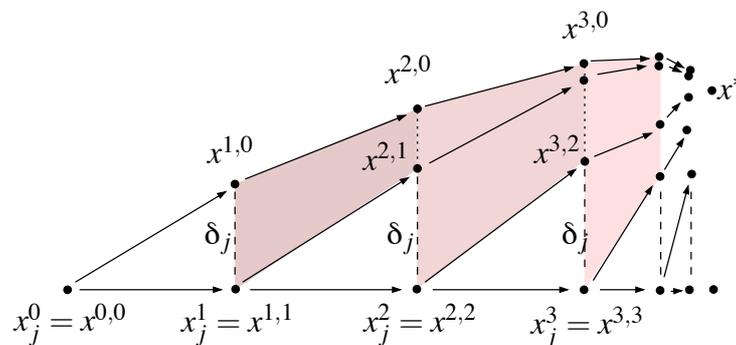


ABBILDUNG 2.31: „Lady Windermere’s fan“ beschreibt die Fehlerentwicklung in diskretisierten Newtonverfahren.

Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen

Bearbeitet von: Klaus Ehrhardt, Marc Steinbach

Kooperationspartner: Ruhrgas AG (Essen); PSI AG (Berlin); Alexander Martin (TU Darmstadt); Rüdiger Schultz (Universität Duisburg)

Förderung: BMBF-Förderschwerpunkt „Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“

Ziel des Projektes ist die optimale operative Planung der Lastverteilung in Erdgas-Leitungsnetzen zur Deckung des aktuellen Bedarfs unter Beachtung technischer und vertraglicher Restriktionen. Die Antriebsenergie für den Gastransport verursacht den Hauptanteil der variablen Betriebskosten, so dass eine Kostenminimierung die geschickte Schaltung und Steuerung aller technischen Anlagen erfordert. Mathematisch führt dies auf hochdimensionale gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme mit nichtlinearen hyperbolischen Differentialgleichungen in den Rohrleitungen.

Im Vorhaben werden gemeinsam mit den industriellen Verbundpartnern Ruhrgas AG und PSI AG die nichtlinearen Modellkomponenten sowie geeignete Vereinfachungen untersucht und es werden für den Fall fixierter 0-1-Schaltvariablen strukturangepasste Optimierungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Letztere sollen später als Teilproblem-Löser in nichtlinearen Branch-and-Bound-Verfahren zum Einsatz kommen, so dass einerseits das Gesamtproblem numerisch lösbar ist und andererseits die relevanten Nichtlinearitäten und kombinatorischen Aspekte soweit möglich direkt erfasst sind.

Die Zielfunktion des nichtlinearen Problems modelliert die summaren Energiekosten für den Betrieb aller Verdichterstationen sowie Bewertungen der Liefer- und Abnahmeverträge. Nebenbedingungen sind technische und vertragliche Restriktionen, insbesondere an den Ein- und Ausspeisestellen, sowie globale oder regionale Erhaltungsbedingungen. Hinzu kommen die – geeignet diskretisierten – Euler-Gleichungen der instationären Gasdynamik für ein reales Gas mit hydraulischem Druckverlust durch Reibung. Das resultierende hochdimensionale nichtlineare Optimierungsproblem liefert optimale zeitliche Steuerungsprofile für die Verdichterstationen und Regelventile. Es kann auch eingesetzt werden zur Bewertung von Entscheidungsvarianten in Havarie- oder Wartungsszenarien.

Im Berichtsjahr wurden zunächst weitere Testrechnungen mit dem nichtlinearen Optimierungsmodell unter Verwendung von SNOPT (Gill et al.) durchgeführt und die Ergebnisse zur Publikation eingereicht [1]. Zur Ausnutzung der zeitlichen und räumlichen Struktur (Netztopologie) wurden spezielle Subproblem-Löser konzipiert, die zum Einsatz in SQP- und Innere-Punkt-Methoden geeignet sind und die effiziente Optimierung sehr großer Netze gestatten. Die Implementierung des hierfür neu entworfenen Softwaredesigns wurde weitgehend abgeschlossen.

Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung

Bearbeitet von: Bernd Gnädig, Marc Steinbach

Kooperationspartner: Berliner Wasserbetriebe; ABB Utilities GmbH (Mannheim)

Förderung: ABB Utilities GmbH (Mannheim)

Die Berliner Wasserbetriebe (BWB) führen täglich eine Bedarfsprognose für jede Stunde des nächsten Tages durch und nehmen auf dieser Basis eine Vorausplanung des Netzbetriebs vor. Stellgrößen hierbei sind die Fördermengen von Rohwasser und Reinwasser in den Wasserwerken, die Drücke der Pumpen, die Füllstände der Tanks und die Stellungen der Schieber. Diese sollen zu einer gegebenen Bedarfsprognose so festgelegt werden, dass die variablen Kosten minimiert werden und sichergestellt ist, dass alle Verbraucher die benötigte Wassermenge mit ausreichendem Druck erhalten. Zusätzlich sind verschiedene technische, physikalische, hygienische und vertragliche Einschränkungen zu berücksichtigen. Die variablen Kosten bestehen aus den Energiekosten zur Förderung und Aufbereitung des Wassers und den Kosten für Betriebsmittel und Grundwasserentnahme.

Projektziel war die Entwicklung eines Optimierungs-Moduls und dessen Implementierung unter GAMS zur Einbindung in das neue Leitsystem Wasserwerke der Berliner Wasserbetriebe. Dies erfolgte in Zusammenarbeit mit der ABB Utilities GmbH.

Die mathematische Modellierung führt auf ein sehr großes nichtlineares Optimierungsproblem mit 1481 Netzknoten, 1935 Kanten und 24 Zeitschritten. Kombinatorische Aspekte (Schalten der Pumpen, Stellung der Schieber, Vermeidung unerwünschter Pumpenwechsel) werden mittels heuristischer Techniken behandelt, da eine gemischt-ganzzahlige Optimierung für diese großen Dimensionen nicht praktikabel ist. Entscheidend für einen ausgewogenen Kompromiss zwischen hoher Modellgenauigkeit und akzeptablen Rechenzeiten waren neben den erwähnten Heuristiken die Entwicklung automatischer Techniken zur Reduktion des Netzmodells sowie die Erzeugung geeigneter Startwerte für die nichtlineare Optimierung mittels Sequentieller Linearer Programmierung.

Die Projektergebnisse sind in zwei Studien dokumentiert [2, 3].

Publikationen

- [1] Klaus Ehrhardt und Marc C. Steinbach, *Nonlinear Optimization in Gas Networks*, Report 03–46, ZIB, 2003.
- [2] Bernd Gnädig und Marc C. Steinbach, *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung*, Studie für ABB Utilities GmbH, Mannheim, 2003.
- [3] _____, *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung mit Gesamtnetzmodell*, Studie für ABB Utilities GmbH, Mannheim, 2004.
- [4] E. Hairer, S. Nørsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. I: Nonstiff Problems*, Springer Series in Computational Mathematics, Band 8, Springer, 1993.
- [5] P. Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algorithms*, Series Computational Mathematics 35, Springer, 2004, to appear.
- [6] M. Weiser, P. Deuffhard, A. Schiela, *Asymptotic Mesh Independence of Newton's Method Revisited*, Report 03–13, ZIB, 2003.
- [7] M. Weiser, *Interior point methods in function space*, Report 03–35, ZIB, 2003.

2.2.7 Diskrete Strukturen

Aus mathematischer Sicht beinhalten viele kombinatorische Optimierungsaufgaben die gleichen grundlegenden Bausteine. Die Untersuchung der Eigenschaften dieser

„diskrete Strukturen“ ist daher besonders attraktiv. Erzielte Resultate kommen unmittelbar vielen anderen Fragestellungen – häufig auch Anwendungen in anderen Gebieten der Mathematik – zugute.

Die Klasse der *perfekten Graphen* ist seit mehreren Jahrzehnten Gegenstand graphentheoretischer Untersuchungen. Obwohl die starke Perfekte-Graphen-Vermutung mittlerweile bewiesen wurde, sind noch viele Fragestellungen bzgl. dieser Graphenklasse und ihrer Verallgemeinerungen unbeantwortet.

Eine andere Klasse von Graphen ist die mit beschränkter *Baumweite*. Für viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme sind Algorithmen mit polynomialer Laufzeit bekannt für den Fall, dass die Baumweite als Konstante betrachtet wird. Für die Verwendung solcher Algorithmen ist eine Baumzerlegung mit möglichst guter Weite notwendig. Die Bestimmung der Baumweite jedoch ist NP-schwer.

In der algorithmischen Geometrie sind *Triangulierungen* ein wichtiges Hilfsmittel. Bei der Erforschung dieser *Polyedrischen Unterteilungen* spielen viele verwandte Bereiche der Mathematik wie Topologie, Algebra und Geometrie eine große Rolle.

Eine dieser Verknüpfungen tritt im Zusammenhang mit *triangulierten Mannigfaltigkeiten* auf: Informationen über die Struktur des Raumes aller möglichen Triangulierungen einer Mannigfaltigkeit ermöglichen erst die Untersuchung traditioneller Klassifikations- und Extremalprobleme mit Computerprogrammen.

Eine spezielle Klasse von Mannigfaltigkeiten, die im Zusammenhang mit der Bestimmung topologischer unterer Schranken für die Färbungszahl eines Graphen auftreten, sind *Graphenfärbungs-Mannigfaltigkeiten*. Ihre Struktur erlaubt in gewissen Fällen Rückschlüsse auf das zugrunde liegende Färbungsproblem.

Neben den Anwendungen in der kombinatorischen Optimierung sind in diesem Schwerpunkt auch die zur Erlangung der Resultate entwickelten *Methoden* von besonderem Interesse.

Die Anschaulichkeit, Verständlichkeit und Anwendbarkeit vieler der oben angesprochenen Themen machen die *Diskrete Mathematik* für den Mathematikunterricht besonders geeignet. Bisher wurde dieser Zweig der Mathematik jedoch kaum in der Schule behandelt. Durch die Erschließung der kombinatorischen Optimierung für den Unterricht sollen die Schülerinnen und Schüler nicht nur moderne Mathematik kennenlernen, sondern auch algorithmisches Denken vermittelt bekommen und mathematisches Modellieren üben.

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Annegret Wagler

Kooperationspartner: Gianpaolo Oriolo (Universität Tor Vergata, Rom, Italien); Arnaud Pêcher (Laboratoire Bordelais de Recherche Informatique, Talence, Frankreich); Gautier Stauffer (École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz)

Förderung: DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“

Stabile Mengen in Graphen bilden eines der wichtigen Modelle in der ganzzahligen Optimierung mit Anwendungen z. B. bei der ÖPNV-Dienstplanung (siehe Projekt *Dienstplanung*) und gewissen Fahrzeugeinsatzplanungen [6]. Das *Stabile-Mengen-Problem*, die Bestimmung einer stabilen Menge größter Kardinalität oder maximalen Gewichts im Graphen, ist jedoch i. a. NP-schwer. Ein Lösungsansatz besteht darin, das Problem als lineares Programm über dem *Stabile-Mengen-Polytop*, der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen, aufzufassen. Die dazu nötige Beschreibung der Facettenmenge des Polytops ist für die meisten Graphenklassen allerdings nicht bekannt.

Für *perfekte Graphen* ist das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar [13]. Der Algorithmus beruht auf einem polynomialen Separationsverfahren für eine Klasse von Ungleichungen, die alle Cliquebedingungen, die nicht-trivialen Facetten des Stabile-Mengen-Polytops perfekter Graphen, enthalten. Ziel ist, durch strukturelle Untersuchungen der Stabile-Mengen-Polytope von Oberklassen perfekter Graphen die polynomiale Lösbarkeit des Stabile-Mengen-Problems für weitere Graphenklassen zu beweisen.

Dazu relaxieren wir den Perfektheitsbegriff bezüglich der Facettenmenge des Stabile-Mengen-Polytops: verallgemeinere die Cliquebedingungen durch andere Ungleichungen und betrachte die Graphen, deren Stabile-Mengen-Polytop diese Ungleichungen als einzige nicht-triviale Facetten hat [14]. Eine natürliche Verallgemeinerung von Cliquebedingungen sind sogenannte Rangbedingungen, eine weitere Verallgemeinerung stellen geliftete Rangbedingungen dar. Die zwei entsprechenden Oberklassen perfekter Graphen sind *rang-perfekte Graphen* und *schwach rang-perfekte Graphen* [40, 41]. In der Literatur sind bereits einige Klassen rang-perfekter und schwach rang-perfekter Graphen bekannt, ein Überblick ist in [42] zu finden. Im vergangenen Jahr konnte gezeigt werden, dass Komplemente von Graphen mit zirkularer Struktur, sogenannte Antiwebs, rang-perfekt sind [43]. Hingegen sind Webs „hochgradig“ nicht rang-perfekt [29, 30, 31]. Eine offene Frage ist, ob Webs schwach rang-perfekt sind.

Webs spielen eine entscheidende Rolle zur Beschreibung der Stabile-Mengen-Polytope zweier größerer Graphenklassen, der Quasi-Linegraphen und der Klauenfreien Graphen [12, 28]. Laut der Ben-Rebea-Vermutung [28] ist eine spezielle Klasse von Ungleichungen, die sog. Clique-Familien-Ungleichungen, zur Beschreibung der Stabile-Mengen-Polytope von Quasi-Linegraphen ausreichend. Am Beweis (oder der Widerlegung) dieser Vermutung für Webs soll gemeinsam mit Gianpaolo Oriolo, Arnaud Pêcher und Gautier Stauffer gearbeitet werden.

Eine informationstheoretische Oberklasse perfekter Graphen bilden die *normalen Graphen*, basierend auf schwacher Additivität der Graph-Entropie (einem informationstheoretischen Funktional, das Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf Stabile-Mengen-Polytopen von Graphen untersucht). Wie sich diese Erweiterung des Perfektheitsbegriffes graphen- bzw. polyedertheoretisch auswirkt und welche Bedeutung dabei den

Wahrscheinlichkeitsverteilungen zukommt, wird im Rahmen der DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“ untersucht.

Über die Klasse der normalen Graphen ist (außer ihrer engen Beziehung zu perfekten Graphen) nicht viel bekannt. Körner und de Simone [17] vermuten, dass jeder C_5, C_7, \bar{C}_7 -freie Graph normal ist (siehe Abbildung 2.32). Diese Vermutung konnte bereits für Webs und Antiwebs verifiziert werden [44].

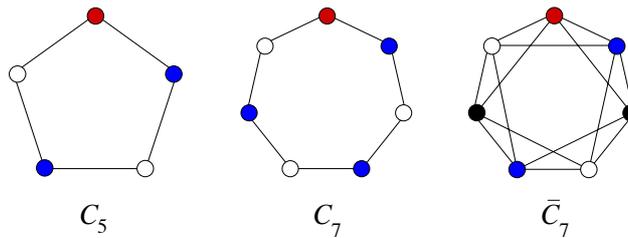


ABBILDUNG 2.32: Die minimal nicht normalen Graphen C_5, C_7, \bar{C}_7 .

Baumweite und Kombinatorische Optimierung

Bearbeitet von: Arie Koster

Kooperationspartner: Hans Bodlaender (Universität Utrecht, Niederlande); Stan van Hoesel, Roel Bovendeerd (Universität Maastricht, Niederlande)

Die *Baumweite* eines Graphen kennzeichnet das Maß seiner Ähnlichkeit zu einem Baum. Die dazugehörige optimale *Baumzerlegung* des Graphen spiegelt diese Baumstruktur wider. Viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme sind auf Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomialer Zeit lösbar. In den letzten Jahren sind mehrere Studien veröffentlicht worden, die zeigen, dass diese Aussage nicht nur theoretischen Wert hat, sondern sich auch immer besser in der Praxis einsetzen lässt [9, 19].

Eine wichtige Voraussetzung für die Verwendung dieses Konzeptes ist die Verfügbarkeit einer Baumzerlegung optimaler oder nahezu optimaler Baumweite. Die meisten theoretischen Lösungen für dieses Problem sind jedoch nicht praktisch einsetzbar, da sich sehr große Konstanten in der O -Notation für die Rechenzeit verbergen. In den vergangenen Jahren wurde deshalb mit der Entwicklung von Verfahren zur Vereinfachung des Problems [4] sowie zur Bestimmung von oberen und unteren Schranken [18] begonnen.

Im Berichtszeitraum wurde die Vereinfachung des Problems der Baumweitenbestimmung erneut aufgegriffen. Neben den Regeln zur Graphvereinfachung [4] können auch *Knoten-Separatoren* für eine Zerlegung des Problems verwendet werden. Hierbei ersetzt man den Graphen durch eine Menge von kleineren Graphen, deren Baumweite sich (hoffentlich) leichter bestimmen lässt. Einen Knoten-Separator bezeichnet man als *sicher*, wenn das Maximum der Baumweiten der kleineren Graphen gleich der Baumweite des Ursprungsgraphen ist. In [3] wurden verschiedene Klassen von siche-

ren Knoten-Separatoren abgeleitet. Eine Rechenstudie belegt, dass ihr Einsatz zu deutlich kleineren Graphen führt. Die bereits im Vorjahr angefangene Implementierung einer C++-Software-Bibliothek wurde um diesen Regeln erweitert.

Darüber hinaus wurde mit der Untersuchung exakter Verfahren begonnen, die auf ganzzahliger linearer Programmierung basieren. Im Mittelpunkt der Betrachtungen steht dabei die Struktur der zugehörigen Polytope. Erste Resultate in dieser Richtung konnten bereits erzielt werden.

Polyedrische Unterteilungen

Bearbeitet von: Jörg Rambau

Kooperationspartner: Jesús A. de Loera (University of California, Davis, USA); Francisco Santos (Universidad de Cantabria, Santander, Spanien)

Polyedrische Unterteilungen von Punktkonfigurationen sind Zerlegungen der konvexen Hülle einer endlichen Punktmenge im euklidischen Raum in endlich viele Polytope, deren Ecken in der gegebenen Punktkonfiguration liegen. Sind alle Polytope einer solchen Zerlegung Simplexe, so spricht man von einer Triangulierung. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können, erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [33, 37]. Elementare Aussagen über die Topologie (z. B. Zusammenhang) und Metrik (z. B. Durchmesser) dieser Räume liefern die theoretischen Grundlagen für Flip-Algorithmen in der Algorithmischen Geometrie.

Seit 2000 steht die Weiterentwicklung des Programmpakets TOPCOM im Mittelpunkt dieses Projektes [34, 35]. In den Jahren 2002/2003 wurde das auf orientierten Matroiden beruhende Konzept veröffentlicht und die Laufzeitkomplexität der implementierten Algorithmen dokumentiert [32, 38]. Ferner wurde die Distribution gepflegt (Anpassung an neue Compiler-Versionen etc.).

Im Berichtsjahr ist eine Schnittstelle von TOPCOM zu CaTS geschaffen worden: CaTS berechnet den *Gröbner-Fächer* (Kegel entsprechen Gröbner-Basen) einer Punktkonfiguration. Dieser Fächer verfeinert den *Sekundärfächer* (Kegel entsprechen Polyedrischen Unterteilungen). Die Berechnung des Gröbner-Fächers kann nun mit TOPCOM und CaTS in zwei Stufen geschehen: TOPCOM berechnet zunächst den Sekundärfächer, danach berechnet CaTS separat für jeden Kegel im Sekundärfächer die Verfeinerung durch den Gröbner-Fächer. Da TOPCOM im Gegensatz zu CaTS Symmetrien ausnutzen kann, konnte vor allem für symmetrische Punktkonfigurationen eine Beschleunigung der Berechnung des Gröbner-Fächers erzielt werden.

Während eines Forschungsaufenthalts am Mathematical Sciences Research Institute Berkeley (MSRI), USA, konnte bewiesen werden, dass ein polygonales Prisma mit zyklisch vorgegebenen Diagonalen nicht ohne neue Ecken trianguliert werden kann [39]. Die Frage war bis dato überraschenderweise noch offen, und erst der nicht-triviale Beweis über den Cayley-Trick [15] zeigt warum. Das neue Resultat liefert nun eine sehr

natürliche Verallgemeinerung des Schönhardt-Polyeders (Dreiecks-Prisma).

In diesem Projekt entsteht ein Lehrbuch zusammen mit Jesús De Loera und Francisco Santos. Ein Vorlesungsskriptum (in deutsch) zu einer Lehrveranstaltung zu diesem Thema an der TU Berlin ist bereits erhältlich [36]. Eine Sommer-Lehrveranstaltung für Graduierte am (MSRI) zum selben Thema ist auf der dortigen Webseite auf Streaming Video zu sehen.

Triangulierte Mannigfaltigkeiten

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Anders Björner (KTH, Stockholm, Schweden); Ulrich Brehm (TU Dresden); Michael Joswig, Ekkehard G. Köhler (TU Berlin); Wolfgang Kühnel (Universität Stuttgart)

In den Anfangszeiten der Topologie wurden Mannigfaltigkeiten vorwiegend anhand ihrer Triangulierungen untersucht. Insbesondere die Berechnung von Invarianten nutzte die zugrundeliegende kombinatorische Struktur, während hierfür später zunehmend algebraische Methoden Einzug fanden. Obgleich es sich herausstellte, dass nicht jede topologische Mannigfaltigkeit triangulierbar ist, gilt seit dem Aufkommen von Computern den kombinatorischen Aspekten von Mannigfaltigkeiten und ihren Triangulierungen erneut großes Interesse. Nötig für viele Untersuchungen ist dabei, auf Triangulierungen von handhabbarem Format zugreifen zu können.

Zu diesem Zwecke wurden im Rahmen des Projektes explizit Triangulierungen für größere Klassen von 3-Mannigfaltigkeiten konstruiert (siehe [2, 7, 8, 24, 26]). Des Weiteren konnten Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig enumeriert werden. Dies wurde beispielsweise für eckentransitive Triangulierungen auf bis zu 13 Ecken (in allen dabei möglichen Dimensionen) durchgeführt, wobei viele bekannte wieder, aber auch einige interessante Beispiele neu entdeckt wurden [16, 21]. Das hierzu entwickelte Enumerationsprogramm konnte im Jahr 2002 u. a. zur Enumeration aller 249015 triangulierten 3-Mannigfaltigkeiten auf 10 Ecken eingesetzt werden, wobei 518 eckenminimale Triangulierungen von $S^2 \times S^1$ gefunden wurden sowie 247882 triangulierte Sphären und 615 Triangulierungen der 3-dimensionalen Kleinschen Flasche [5]. Die durch die Enumeration gewonnenen Sphären wurden weiter untersucht. So konnte im Berichtsjahr festgestellt werden, dass alle 3-dimensionalen Sphären mit bis zu 10 Ecken schälbar sind. Andererseits konnten 3-Sphären mit nur 13 Ecken konstruiert werden, die nicht-schälbar und sogar nicht-konstruierbar sind [23]: Hierzu wird eine Kleeblattschlinge auf geeignete Weise in einen Ball eingebaut, der dann zu einer Sphäre vervollständigt wird (siehe Abbildung 2.33).

Nicht-schälbare 3-Bälle konnten sogar mit nur 9 Ecken gefunden werden [22], ebenso nicht eckenzerlegbare 3-Bälle mit nur 7 Ecken [25], wobei per Enumeration gezeigt werden konnte, dass diese Eckenzahlen jeweils minimal sind.

Für das Jahr 2004 stehen im Rahmen des Projekts mehrere Veröffentlichungen zur Fer-

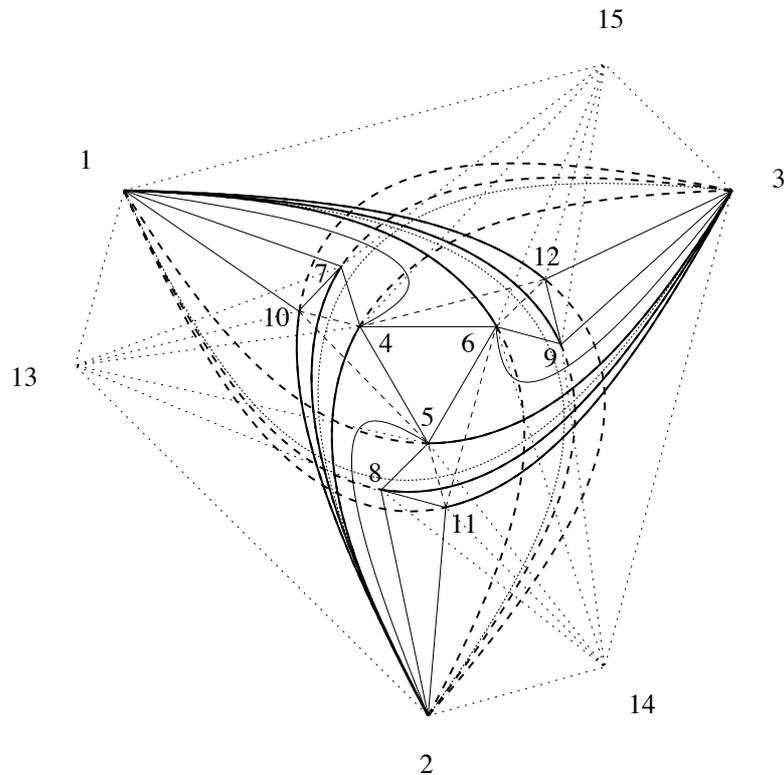


ABBILDUNG 2.33: Konstruktion eines nicht-konstruierbaren 3-Balles.

tigstellung an, insbesondere das im Berichtsjahr wesentlich vorangeschrittene Buchprojekt „Triangulated Manifolds with Few Vertices“. Zugehörige Datensammlungen [27] und ein Kapitel über geometrische 3-Mannigfaltigkeiten [24] sind bereits erhältlich.

Graphenfärbungen: Topologische untere Schranken

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Péter Csorba (ETH, Zürich, Schweiz)

In seinem bemerkenswerten Beweis von 1978 [20] der Kneser-Vermutung setzte László Lovász erstmalig Werkzeuge der algebraischen Topologie ein, um untere Schranken für die Färbungszahl $\chi(G)$ eines Graphen G zu gewinnen. Hierbei wird dem Graphen G ein Simplicial- (oder Zell-)Komplex zugeordnet, dessen topologische Invarianten dann zur Berechnung der unteren Schranken herangezogen werden.

Computer-Berechnungen dieser Invarianten werden mittlerweile standardmäßig durchgeführt, um explizite Beispiele analysieren und verstehen zu können, mit dem Ziel, anschließend allgemeinere Vermutungen oder Sätze aufstellen zu können.

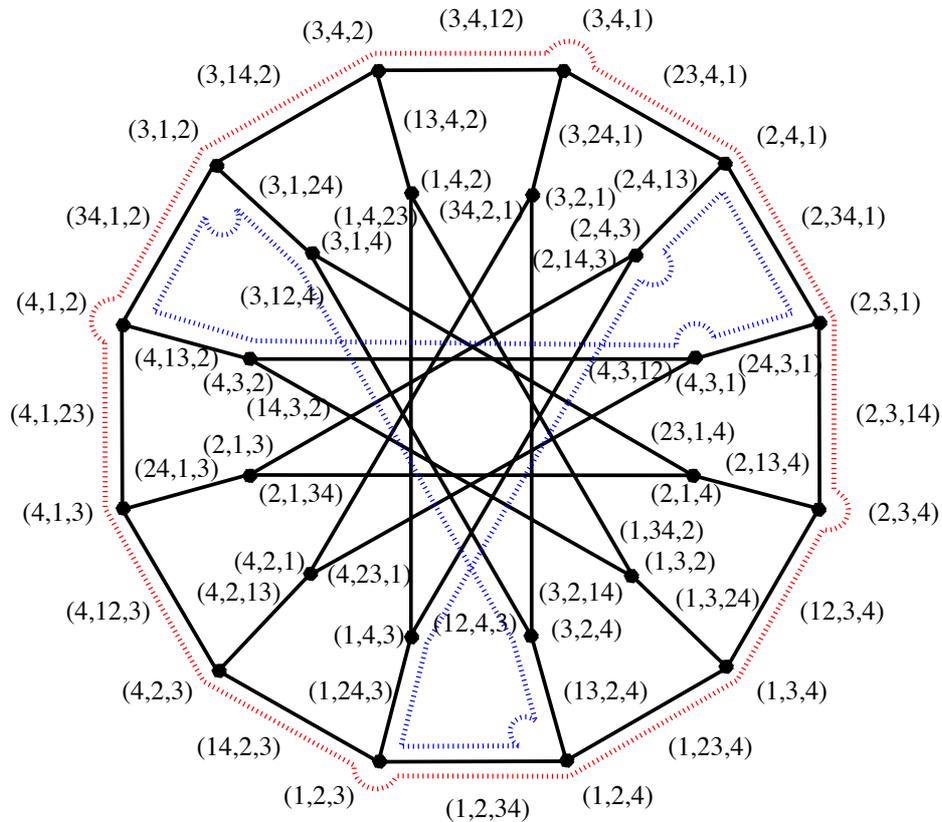


ABBILDUNG 2.34: Der Hom-Komplex $\text{Hom}(K_3, K_4)$ in $\text{Hom}(\overline{C}_7, K_4)$.

In ihrer kürzlich vorgestellten Arbeit [1] beweisen Babson and Kozlov eine Vermutung von Lovász: Falls für einen Graphen H der von Lovász eingeführte Hom-Komplex $\text{Hom}(C_{2r+1}, H)$ k -zusammenhängend ist für ein $r \geq 1$, so ist $\chi(H) \geq k + 4$.

In Zusammenarbeit mit Péter Csorba konnte bei diesem neuen Projekt gezeigt werden, dass der Zellkomplex $\text{Hom}(C_5, K_{n+2})$ die Struktur eines $(n - 1)$ -Sphären-Bündels über der n -Sphäre hat [10], woraus sich in diesem Fall die topologischen Invarianten unmittelbar ableiten lassen. Zudem konnten jene Graphen G charakterisiert werden, für die die Komplexe $\text{Hom}(G, K_n)$ Mannigfaltigkeiten sind [11] (siehe beispielsweise die in Abbildung 2.34 dargestellte nicht-zusammenhängende Mannigfaltigkeit $\text{Hom}(\overline{C}_7, K_4)$). Diese *Graphenfärbungs-Mannigfaltigkeiten* und ihre topologischen und kombinatorischen Eigenschaften sollen weiter untersucht werden.

Diskrete Mathematik für die Schule

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Brigitte Lutz-Westphal

Kooperationspartner: Lisa Hefendehl-Hebeker (Universität Duisburg-Essen); Jürg Kramer (HU Berlin); Kurt Mehlhorn (Max-Planck-Institut Saarbrücken); Algorithmic

Solutions Software GmbH; Geschwister-Scholl-Schule Tübingen; Herder-Oberschule Berlin; Romain-Rolland-Oberschule Berlin; Wildermuth-Gymnasium Tübingen

Förderung: Volkswagen-Stiftung

Im Mathematikunterricht an der Schule wird kaum Diskrete Mathematik behandelt, obwohl dieser Zweig der Mathematik in Forschung und Praxis von großer Bedeutung ist. Insbesondere ist der Teilbereich der Kombinatorischen Optimierung in der Schule bislang nahezu unbekannt. Dafür, dass sich dies ändern sollte, sprechen etliche Gründe.

Zunächst einmal überzeugt der starke Anwendungsbezug. An vielen Stellen im Alltag profitieren wir vom Einsatz von Diskreter Mathematik, z. B. wenn die Busse pünktlich fahren, die Müllabfuhr kommt oder beim Telefonieren. Solche Themen sind für Schülerinnen und Schüler nicht nur interessant und motivierend, sondern bieten auch den Vorteil, dass relativ wenige bis gar keine Vorkenntnisse erforderlich sind. Die Fragestellungen an sich sind spontan verständlich. Man möchte beispielsweise so schnell wie möglich mit der U-Bahn ans Ziel kommen oder dem Postzusteller unnötige Wege ersparen. Erste Lösungsvorschläge können gemacht werden, ohne dass viele Fachbegriffe notwendig sind. Dies ermöglicht einen unbefangenen Zugang zu den Themen und setzt kreative Denkprozesse in Gang. Ein problemorientierter Unterricht liegt mit diesen Themen auf der Hand. Die Schülerinnen und Schüler erfahren dabei, wie sich aus einer anwendungsbezogenen Fragestellung heraus eine mathematische Theorie entwickeln kann.

Die Methoden der Diskreten Mathematik unterscheiden sich stark von denen der traditionell unterrichteten Stoffgebiete. Schülerinnen und Schüler lernen hier algorithmisches Denken und neue Argumentations- und Sichtweisen. Zudem steht mathematische Modellbildung am Beginn jeder Optimierung. Die Zerlegung von komplexen Sachverhalten in kleinere Teilprobleme ist eine Strategie, die hier häufig gebraucht wird und die die Fähigkeit zum allgemeinen Problemlösen fördert.

Das Ziel des Projektes ist, Themen der Kombinatorischen Optimierung für den Unterricht an Schulen zugänglich zu machen. In erster Linie werden Unterrichtsmaterialien entwickelt, d. h. Arbeitsmaterial für die Schülerinnen und Schüler sowie verständliche Darstellungen der Themen für die Lehrkräfte. Letzteres ist besonders wichtig, da mit diesen Themen auch ein methodischer Ansatz verfolgt wird, der besonderes Augenmerk auf eine aktive Rolle der Schülerinnen und Schüler legt. Das bedeutet, dass die Arbeitsmaterialien für den Unterricht nur Impulse zum Weiterdenken beinhalten und nicht den ganzen Stoff wiedergeben. Die inhaltliche Orientierung bietet dann das Material für die Lehrerinnen und Lehrer. Erste Materialien wurden bereits im Unterricht in Tübingen erprobt.

Im Berichtszeitraum fanden weitere Unterrichtsversuche statt. Kürzeste-Wege-Algorithmen waren das Thema im Profilkurs Klasse 11 der Herder-Oberschule Berlin-Charlottenburg. Die Schülerinnen und Schüler entwickelten schon nach wenigen Unterrichtsstunden selbständig Algorithmen für die Konstruktion von kürzesten Wegen auf gewichteten und ungewichteten Graphen. Im Rahmen dieser Unterrichtsreihe wur-

den Unterrichtsmethoden zur Fehlersuche und zum korrekten Aufschreiben von Algorithmen entwickelt. Im Profilkurs Klasse 11 der Romain-Rolland-Oberschule in Berlin-Reinickendorf wurde das Traveling-Salesman-Problem behandelt. Auch hier zeigte sich, dass diese Themen stark motivierend sind und sich hervorragend zum selbständigen Erarbeiten eignen.

Die Vorträge für Lehrerinnen und Lehrer sowie die Radiosendung „Von der Schönheit und dem Nutzen der Mathematik“ (InfoRadio Berlin), in der u. a. das Projekt „Diskrete Mathematik für die Schule“ thematisiert wurde, riefen eine breite Resonanz hervor. Um die interessierten Lehrkräfte bei der Umsetzung der Themen in den Unterricht zu unterstützen, sind für das Jahr 2004 Lehrerfortbildungen in verschiedenen Städten geplant. Zudem haben verschiedene Schulbuchverlage und Zeitschriften bereits Interesse an der Veröffentlichung der Unterrichtsmaterialien geäußert.

Mit dem Beschluss der Einführung bundesweiter Bildungsstandards hat sich die Lehrplandebatte etwas verändert. Die Bildungsstandards schreiben nur noch einen Teil der Inhalte vor. Die zu erlernenden sogenannten allgemeinen Kompetenzen dürfen auch anhand von frei zu wählenden Inhalten gelehrt werden. Hier liegt die Möglichkeit, die kombinatorische Optimierung im Schulunterricht zu verankern.

Publikationen

- [1] E. Babson und D. N. Kozlov, *Topological obstructions to graph colorings*, Electron. Res. Announc. Amer. Math. Soc. 9, 61–68 (2003).
- [2] A. Björner und F. H. Lutz, *A 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere and non-PL spheres with few vertices*, Electronic Geometry Model No. 2003.04.001 (2003), online¹ verfügbar.
- [3] H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe Separators for Treewidth*. In: *Joint Proceedings of the workshop on Algorithm Engineering and Experiments (ALENEX'04) and the workshop on Analytic Algorithmics and Combinatorics (ANALCO'04)*, New Orleans, Januar 2004.
- [4] H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster, F. van den Eijkhof und L. C. van der Gaag, *Pre-processing for Triangulation of Probabilistic Networks*. In: J. Breese und D. Koller (Hrsg.): *Proceedings of the 17th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, 32–39, San Francisco, 2001. Morgan Kaufmann Publishers.
- [5] J. Bokowski, D. Bremner, F. H. Lutz und A. Martin, *Combinatorial 3-manifolds with 10 vertices*, in Vorbereitung.
- [6] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.

¹<http://www.eg-models.de/2003.04.001>

-
- [7] U. Brehm und F. H. Lutz, *Triangulations of Seifert manifolds*, in Vorbereitung.
- [8] ———, *Triangulations of Sol manifolds*, in Vorbereitung.
- [9] W. Cook und P. Seymour, *Tour Merging via Branch-Decomposition*, *INFORMS Journal on Computing*, 15(3):233–248, 2003.
- [10] P. Csorba und F. H. Lutz. *Graph colorings and sphere bundles*, in Vorbereitung.
- [11] ———, *Graph coloring manifolds*, in Vorbereitung.
- [12] A. Galluccio und A. Sassano, *The Rank Facets of the Stable Set Polytope for Claw-Free Graphs*. *J. Comb. Theory B* **69** (1997) 1–38.
- [13] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [14] ———, *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*, Springer, Berlin, 1988.
- [15] B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Preprint SC 98-44, ZIB, 1999.
- [16] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Combinatorial manifolds with transitive automorphism group on few vertices*, Manuskript, 1999.
- [17] J. Körner und C. de Simone, *On the Odd Cycles of Normal Graphs*, *Discrete Appl. Math.* **94** (1999) 161–169.
- [18] A. M. C. A. Koster, H. L. Bodlaender und C. P. M. van Hoesel, *Treewidth: Computational Experiments*, Report 01–38, ZIB, 2001.
- [19] A. M. C. A. Koster, C. P. M. van Hoesel und A. W. J. Kolen, *Solving partial constraint satisfaction problems with tree decomposition*, *Networks*, 40(3):170–180, 2002.
- [20] L. Lovász. *Kneser’s conjecture, chromatic number, and homotopy*, *J. Comb. Theory, Ser. A* **25**, 319–324 (1978).
- [21] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, *Berichte aus der Mathematik*, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [22] ———, *A vertex-minimal non-shellable simplicial 3-ball with 9 vertices and 18 facets*, *Electronic Geometry Model*, to appear.
- [23] ———, *Small examples of non-constructible simplicial balls and spheres*, *SIAM J. Discrete Math.*, to appear, Report 03–28, ZIB, 2003, arXiv:math.CO/0309149.

- [24] ———, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Geometric 3-Manifolds*, Report 03–36, ZIB, 2003, arXiv:math.GT/0311116.
- [25] ———, *Vertex-minimal not vertex-decomposable balls*, Electronic Geometry Model, to appear.
- [26] ———, GAP-program SEIFERT (Version Nov/2003), online², 2003.
- [27] ———, *The Manifold Page*, online³, 2000–2003.
- [28] G. Oriolo, *Clique Family Inequalities for the Stable Set Polytope for Quasi-Line Graphs*, In: Special Issue on Stability Problems, Discrete Applied Math. **132** (2003) 185–201.
- [29] A. Pêcher und A. Wagler, *On Non-Rank Facets of Stable Set Polytopes of Webs with Clique Number Four*, Report 03–01, ZIB, 2003.
- [30] ———, *A Construction for Non-Rank Facets of Stable Set Polytopes of Webs*, Report 03–21, ZIB, 2003.
- [31] ———, *Almost all webs with odd clique number > 3 are not rank-perfect*, Report RR-1305-03, LaBRI, 2003.
- [32] J. Pfeifle und J. Rambau, *Computing triangulations using oriented matroids*, Algebra, Geometry and Software Systems (Michael Joswig und Nobuki Takayama, Hrsg.), Springer, 2003.
- [33] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [34] ———, *TOPCOM—Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software under the Gnu Public Licence, available for download⁴, 1999.
- [35] ———, *Point configuration and a triangulation without flips as constructed by Santos*, Electronic Geometry Model No. 2000.08.005, 2000, online⁵ verfügbar.
- [36] ———, *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern*, Report 00–46, ZIB, 2000, Lecture notes for a course given at Technische Universität Berlin in the summer term 2000, online⁶ verfügbar.
- [37] ———, *Circuit admissible triangulations of oriented matroids*, Discrete & Computational Geometry **27** (2002), 155–161.

²<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/SEIFERT>

³<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/>

⁴<http://www.zib.de/rambau/TOPCOM>

⁵<http://www.eg-models.de/2000.08.005>

⁶<http://www.zib.de/PaperWeb/abstracts/ZR-00-46>

- [38] ———, *TOPCOM: Triangulations of point configurations and oriented matroids*, Mathematical Software—ICMS 2002 (Arjeh M. Cohen, Xiao-Shan Gao und Nobuki Takayama, Hrsg.), World Scientific, 2002, 330–340.
- [39] ———, *On a generalization of Schönhardt's polyhedron*, Preprint 2003-013, MSRI, 2003.
- [40] A. Wagler, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Cuvillier, Göttingen, 2000, Dissertation, TU Berlin.
- [41] ———, *Rank-Perfect and Weakly Rank-Perfect Graphs*, Mathematical Methods of Operations Research **95** (2002), 127–149.
- [42] ———, *Relaxing Perfectness: Which Graphs are Almost Perfect?*, erscheint in: The Sharpest Cut – The impact of Manfred Padberg and his work, (M. Grötschel, Hrsg.), MPS-SIAM Series on Optimization.
- [43] ———, *Antiwebs are Rank-Perfect*, erscheint in: Quaterly Journal of the Belgian, French and Italian OR Societies.
- [44] ———, *The Normal Graph Conjecture is true for Circulants*, Report 04–06, ZIB, 2004.

2.2.8 Telekommunikation

Die Telekommunikation ist eine der Schlüsseltechnologien unserer Informationsgesellschaft. Der rasante technische Fortschritt ermöglicht ständig neue, innovative Anwendungen und Dienste. Bestes Beispiel hierfür ist UMTS. Der scharfe Wettbewerb innerhalb der Branche zwingt die Netzbetreiber aber auch dazu, ihre Investitionen genau zu planen und immer wieder Einsparungsmaßnahmen durchzuführen. Gleichzeitig ist es wichtig, die Qualität der angebotenen Dienste zu verbessern, um neue Kunden zu gewinnen und langfristig an sich zu binden.

Die mathematische Optimierung bietet sich für viele solcher Aufgabenstellungen als Planungswerkzeug an [6]. Im Rahmen dieses Schwerpunktes untersuchen wir vor allem konkrete praktische Problemstellungen aus verschiedenen Bereichen der Netzplanung und -analyse und entwickeln dafür geeignete Lösungsmethoden. Darüber hinaus erfolgt innerhalb des DFG-Zentrums "Mathematik für Schlüsseltechnologien" auch die vertiefte Behandlung grundlegender Themen.

Performance-Analyse eines Prozessors für ISDN- und GPRS-Netze

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (HU Berlin), Siemens AG (München)

Mikroprozessoren bearbeiten den Signalisierungsprozess in ISDN-Netzen und die Datenpakete in GPRS-Netzen. Bei GPRS-Netzen führt die Kodierung zu einem zwei-

ten Durchlauf der Datenpakete und somit zu einer Rückkopplung. Verschiedene Prozessor-Scheduling-Disziplinen werden zur Überlastkontrolle, effizienten Ausnutzung der Caches und zur Sicherung von Performance-Charakteristiken angewendet. Bei der Round-Robin-Disziplin erhalten die Bedienzeit-Anforderungen nacheinander zyklisch ein festes Quantum an Bedienung. Als Grenzfall, bei dem die Quanten gegen Null streben, ergibt sich die Prozessor-Sharing-Disziplin, vgl. [8]. Die Prozessor-Sharing-Disziplin sichert, dass Forderungen mit relativ kleiner Bedienungsanforderung nicht zu lange auf das Ende ihrer Bedienung warten müssen. Um einen großen Steuer-Overhead zu vermeiden, ist es sinnvoll, neu ankommende Forderungen zunächst in einem Cache zu sammeln und erst zu gewissen Gate-Öffnungszeiten zur Bearbeitung in den Prozessor zu holen.

Das Ziel dieses Projektes ist die Performance-Analyse eines Prozessors unter Prozessor-Sharing-Disziplin mit Gate. Da im Unterschied zu FCFS (first come first served) die Dynamik unter Prozessor-Sharing auch von zukünftig eintreffenden Forderungen abhängt, ist die Performance-Analyse von Prozessor-Sharing-Systemen schwieriger als die von FCFS-Systemen. Basierend auf einer neuen Beziehung zwischen den Verweilzeiten von Forderungen unter Prozessor-Sharing und FCFS, vgl. [9], wurden effiziente Algorithmen für die ersten beiden Momente der Verweilzeiten von Forderungen im System ohne Rückkopplung (ISDN-Netze) entwickelt. Im System mit Rückkopplung (GPRS-Netze) treten ab einer gewissen Last Übergänge zwischen mehreren fast stationären Zuständen auf. Diese Beobachtung erlaubte eine fast vollständige Dekomposition des Zustandsraumes, auf der eine Approximation für die mittlere Verweilzeit der Forderungen im System mit Rückkopplung beruht.

Betriebsoptimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)

Bearbeitet von: Andreas Bley

Kooperationspartner: DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (Berlin)

Das Internet ist ein Verbund aus vielen eigenständig administrierten Teilnetzen. Das meistbenutzte Routingverfahren innerhalb dieser autonomen Teilnetze ist derzeit das OSPF-Routing Protokoll (Open Shortest Path First). Es definiert die Art und Weise, wie die Verkehrsströme im Netz geroutet werden und wie sich diese Routen in Fehlerfällen ändern: Jeder Verbindung im Netz wird dabei durch den Administrator ein fester Längenwert, ein sogenanntes Routinggewicht zugewiesen. Das OSPF-Protokoll bestimmt dann bezüglich dieser Routinggewichte für jedes Quelle-Senke-Paar einen kürzesten Weg im Netz und routet die entsprechenden Daten auf diesem Weg. Bei der Planung eines solchen Netzes müssen die Netztopologie, die Verbindungskapazitäten, die Konfiguration der Knoten sowie die Routinggewichte auf die erwarteten Verkehrsanforderungen abgestimmt werden. Um einen stabilen und störungsfreien Betrieb des Netzes zu gewährleisten müssen dabei auch mögliche Ausfälle berücksichtigt werden.

Ein Schwerpunkt dieses Projektes ist die planerische Unterstützung des DFN-Vereins

beim Betrieb des G-WiN. Seit seiner Inbetriebnahme im Juni 2000 zählt das G-WiN zu den weltweit leistungsfähigsten privaten Netzinfrastrukturen. Es verbindet 564 wissenschaftliche Einrichtungen und andere Standorte miteinander und hatte im Jahr 2003 monatlich ein Datenvolumen von über einem Petabyte zu bewältigen. Damit übertrifft es das nordamerikanische Forschungsnetz Abilene sowohl bezüglich der verfügbaren Übertragungskapazitäten als auch der Anzahl der Anschlüsse. Infolge der ständig wachsenden Verkehrsanforderungen stellt sich in regelmäßigen Abständen die Frage, ob sich die veränderten Datenströme durch Anpassen der Routinggewichte noch im vorhandenen Netz realisieren lassen oder ob und wie das Netz ausgebaut werden muss. Mithilfe der in den Vorjahren entwickelten mathematischen Methoden und Algorithmen [2, 4, 5] wurden dazu im Berichtszeitraum zahlreiche Berechnungen für den DFN-Verein durchgeführt.

Inhalt des zweiten Arbeitspaketes ist die Evaluierung der verwendeten Optimierungsmethoden und der Entwurf von Methoden zur längerfristigen und mehrere Zeithorizonte überspannenden Netzplanung. Dabei sollen die bei der regelmäßigen Planung des G-WiN berechneten Lösungen nachträglich anhand der tatsächlich im Netz gemessenen Verkehrsdaten bewertet werden. Die Ergebnisse dieser Auswertung können die Grundlage für mögliche neue Ansätze zu einer langfristigen Mehrperiodenplanung sein.

Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze

Bearbeitet von: Arie Koster, Roland Wessälly, Adrian Zymolka

Kooperationspartner: T-Systems Nova GmbH (Berlin)

In modernen Telekommunikationsnetzen wird zunehmend optische Technologie eingesetzt. Dabei werden digitale Signale als kurze Lichtpulse auf Glasfasern übermittelt, wodurch weit höhere Übertragungsraten als mit elektronischen Signalen erzielt werden. Das optische Medium ermöglicht zudem das sogenannte *Wavelength Division Multiplexing* (WDM), mit dem auf einer Glasfaser durch Verwendung verschiedener Wellenlängen mehrere Kanäle parallel genutzt werden können. Zu den modernsten Komponenten gehören die *Optical Cross-Connects* (OXCs), die das direkte Schalten optischer Verbindungen in den Netzknoten ohne die bislang nötige Rückwandlung der Signale in elektronische Form ermöglichen. Durch die Integration dieser Schalteinheiten entstehen innerhalb der Netze durchgängig optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden. Bei der Planung optischer Netze stellt sich für Netzbetreiber die Aufgabe, zur Erfüllung gegebener Verkehrsbedarfe eine Konfiguration der Lichtwege sowie der dafür zu installierenden Hardwarekomponenten zu ermitteln, die die Gesamtkosten des Netzes minimiert. Um das Netz gegen Störfälle abzusichern, sind dabei zusätzlich Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen.

Das Ziel dieses Projektes besteht darin, effiziente Methoden zu erarbeiten, mit denen sich geeignete Netzkonfigurationen mit mathematisch beweisbarer Güte berechnen lassen. Als Grundlage dient das in den Vorjahren entwickelte Lösungsverfahren [30].

Es basiert auf einem Dekompositionsansatz, bei dem zwei aufeinanderfolgende Teilprobleme zu lösen sind. Das erste Teilproblem umfasst das Routing der Lichtwege sowie die Dimensionierung der dazu notwendigen Kapazitäten. Für diese Aufgabe lassen sich wegen der Ähnlichkeit zur bisherigen Netzplanung bereits vorhandene Lösungsmethoden einsetzen (vgl. [29]). Die speziellen Eigenschaften der Optik führen im zweiten Teilproblem zu der charakteristischen Aufgabenstellung, für die resultierenden Lichtwege eine konfliktfreie Wellenlängenzuordnung zu ermitteln. Ein Konflikt tritt dann auf, wenn verschiedene Lichtwege auf einer Glasfaser die gleiche Wellenlänge verwenden. Konverter erlauben es, innerhalb eines Lichtweges die Wellenlänge zu wechseln. Aufgrund der damit verbundenen Kosten ist die Anzahl notwendiger Konverter zu minimieren.

Im Berichtszeitraum wurde das Lösungsverfahren methodisch und konzeptionell weiterentwickelt. Ein Schwerpunkt lag auf der Bestimmung zulässiger Wellenlängenzuordnungen mit möglichst wenig Konversionen. Hierfür wurden ergänzende Heuristiken erarbeitet und in einer Rechenstudie [23] evaluiert. Gleichzeitig ist die Untersuchung exakter Ansätze vorangetrieben worden, mit denen auf die Herleitung unterer Schranken zur Güteabschätzung der erzeugten Lösungen abgezielt wird.

Als weiterer Schwerpunkt wurde die ressourceneffiziente Umsetzung von Ausfallsicherheit fokussiert. In optischen Netzen wird die gemeinsame Nutzung von Reservekapazitäten für nicht zeitgleich ausfallende Verbindungen durch die erforderliche Wellenlängenzuordnung erschwert oder gar verhindert. In der Praxis eingesetzte Sicherheitskonzepte erfordern daher meist das Vorhalten großer Ersatzkapazitäten. Demgegenüber erlaubt das von uns entwickelte Konzept *Demand-wise Shared Protection* (DSP) bedeutende Einsparungen [24], die aus der Reduktion der Anzahl benötigter Ersatzverbindungen bei geschickter Ausnutzung des verfügbaren Netzzusammenhangs resultieren.

FAP Web

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Arie Koster

Im Jahr 2000 wurde das FAP Web [17] eingerichtet. Dabei handelt es sich um ein Internet-basiertes Informations- und Datenangebot für Forscher, die im Bereich Algorithmenentwicklung für Frequenzzuweisungsprobleme tätig sind. Neben der Beschreibung mehrerer Varianten von Frequenzzuweisungsproblemen, vgl. [16], stehen auch praxisnahe Testdaten einschließlich Referenzlösungen zu Forschungszwecken zur Verfügung.

Der Inhalt des FAP Webs geht ursprünglich aus den Promotionen von Arie Koster [22] und Andreas Eisenblätter [11] sowie der Mitarbeit im EU COST 259 Projekt [10] hervor. Während des Berichtszeitraumes sind mehrmals Aktualisierungen und Erweiterungen des Angebotes vorgenommen worden, das nach wie vor rege in Anspruch genommen wird.

MOMENTUM

Bearbeitet von: Hans-Florian Geerdes, Martin Grötschel, Thorsten Koch, Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Atesio GmbH (Berlin), E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf), KPN Research (Leidschendam, Niederlande), Siemens AG (Berlin), Technische Universität Braunschweig, Technische Universität Darmstadt, Technische Universität Lissabon (Portugal), Vodafone Telecel (Lissabon, Portugal)

Förderung: EU Projekt MOMENTUM, IST-2000-28088

Mit der Einführung von Mobilfunknetzen nach UMTS-Standard sind planerische Herausforderungen verbunden [19]. Ließ sich zum Beispiel bei GSM die Netzabdeckung noch weitgehend unabhängig von der Netzkapazität planen, so sind diese beiden Aspekte bei UMTS untrennbar verwoben. Den Planern stehen zwar für den bereits begonnenen Aufbau von UMTS-Netzen einige Simulationswerkzeuge zur Verfügung, die Güte der einzelnen Werkzeuge muss sich jedoch im praktischen Einsatz erst noch beweisen. Methoden oder Programme zur systematischen Planung und Optimierung der Konfiguration von UMTS-Basisstationen unter weitgehender Berücksichtigung ihres komplexen Zusammenspiels sind derzeit noch am Anfang ihrer Entwicklung, siehe etwa [26].

Das europäische Projekt *Models and Simulations for Network Planning and Control of UMTS* (MOMENTUM) setzte an diesem Punkt an [20]. Es wurden Techniken und Algorithmen für die Planung und Optimierung der UMTS-Funkschnittstellenkonfiguration entwickelt, die künftig Eingang in die Planungs- und Optimierungswerkzeuge der Netzbetreiber finden sollen. Deshalb waren neben mathematischen und nachrichtentechnischen Forschungsgruppen auch ein Systemtechniklieferant und drei Netzbetreiber an dem Projekt beteiligt.

Im Berichtszeitraum wurde das Projekt um zwei Monate, bis zum 31.10.2003, verlängert. Das ZIB war federführend bei der Weiterentwicklung der XML-Schemata für die strukturierte Speicherung von Daten für die UMTS-Funknetzplanung und -simulation. Auf der Basis dieser Formate wurden mehrere realitätsnahe Planungsszenarien zusammengestellt, die teilweise öffentlich zur Verfügung stehen [21]. Folgende Aspekte sind in diesen Planungsszenarien detailliert beschrieben: ungleichmäßige Verkehrsabschätzungen für verschiedene Dienste, stochastische Beschreibungen der Dienste und Nutzungsbedingungen, Mobilität der Nutzer, Landnutzungsdaten, realistische Signalausbreitungsinformationen, sowie technische Eigenschaften der Netzkomponenten.

Für die Szenarien wurden mit Hilfe eines gemischt-ganzzahligen linearen Optimierungsmodells kosteneffiziente UMTS-Funkzugangsnetze unter Netzqualitätsbedingungen berechnet [12]. Dieses Modell wurde auch benutzt, um in mehrstufigen Verfahren sukzessiv Teilprobleme zu lösen; die Ergebnisse wurden daraufhin zu Lösungen für das Planungsproblem kombiniert. Ein Netzentwurf für Den Haag ist in Abbildung 2.35 dargestellt, weitere Ergebnisse wurden in [15] veröffentlicht. Die Güte der Ergebnisse wurde innerhalb des Projektes durch Simulation bestätigt. Im Rahmen



ABBILDUNG 2.35: Für die dargestellte Lastkarte (links) wurde das Netz mit der dargestellten Zellenkonfiguration (rechts) berechnet (*best server* Karte). In den Gebieten mit höherer Lastvorhersage (Nordwesten) sind die Zellen erkennbar kleiner.

dieser Arbeit wurden verschiedene Software-Prototypen zur Visualisierung, Analyse und Evaluation von Eingabedaten und Planungsergebnissen entwickelt [13]. Für einige Netze wurden am Hochleistungsrechenzentrum des ZIB dynamische Simulationen mittels parallelisierter Algorithmen durchgeführt.

Optimierung in der Telekommunikation: Integrierte Planung von Multi-Level-/Multi-Layer Netzen

Bearbeitet von: Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Roland Wessälly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf), T-Systems Nova GmbH (Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekt B3

Ein modernes Telekommunikationsnetz besteht aus Kern- und Zugangsnetzen, jedes von ihnen mit unterschiedlichen Technologien und Protokollen. Einige der Verbindungen innerhalb und zwischen diesen Teilnetzen sind logische Verbindungen, die in Wirklichkeit in anderen Teilnetzen und technologischen Schichten realisiert werden. Dies führt zu einer Einbettungshierarchie von Teilnetzen, wie in Abbildung 2.36 zu sehen. Beispielsweise kann ein IP-Netz über ein ATM-Netz realisiert werden, welches wiederum in ein SDH-Netz und schließlich in ein WDM-Netz eingebettet wird.

Das Netzplanungsproblem für jede technologische Schicht umfasst dabei Entscheidungen zur Topologie (Standorte mit physikalischen und logischen Verbindungen), zur Konfiguration der Hardware (Router, Cross-Connects und Interface-Karten) und zum Routing aller Kommunikationsbedarfe unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheitsanforderungen. Bei einer Mehrschichtenplanung muss zusätzlich über die Zuordnung der Standorte zu Teilnetzen und Technologien und über die Auswahl und Dimensionierung der Verbindungen zwischen den Teilnetzen entschieden werden. Außerdem ist eine koordinierte Routingplanung über mehrere Schichten notwendig.

Aus mathematischer Sicht hat sich die Planung von Kommunikationsnetzen innerhalb

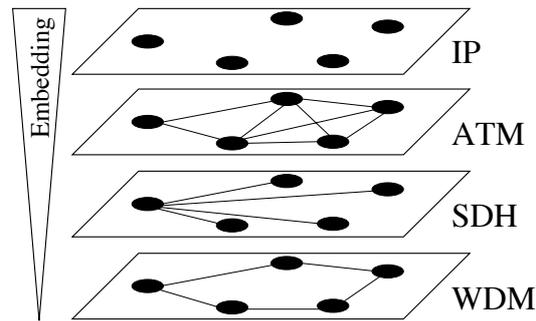


ABBILDUNG 2.36: Schichtenmodell in der Netzplanung

des vergangenen Jahrzehntes von der reinen Topologieplanung [18, 28] hin zur integrierten Planung von Topologie, Hardware und ausfallsicherem Routing innerhalb einer einzelnen Netzschicht [1, 2, 3, 25, 27, 29] entwickelt. Die zugehörigen mathematischen Modelle und Methoden für eine einzelne Netzschicht, aber auch für die Hierarchieentscheidung [4, 5, 7] sind in ausreichendem Maße entwickelt. Eine integrierte Planung mehrerer technologischer Netzschichten dagegen ist zwar für Netzbetreiber von zunehmender Wichtigkeit, um weitere Kostenreduktionen durch intelligenteren Einsatz vorhandener Ressourcen zu realisieren, steckt aber trotz ihrer Bedeutung für die Praxis noch in den Kinderschuhen. Die vielen technologischen Nebenbedingungen, Protokolleigenschaften und Abhängigkeiten zwischen den Entscheidungen sind mitverantwortlich für die Größe und Komplexität der resultierenden diskreten mathematischen Optimierungsmodelle.

Innerhalb des DFG-Forschungszentrums werden nun in Zusammenarbeit mit mehreren Telekommunikationsfirmen mathematische Modelle und Lösungsverfahren zur *integrierten* Planung von Topologie, Dimensionierung, Hardware, Routing und Ausfallsicherheit über mehrere technologische Netzschichten hinweg entwickelt. Die Modellbildungsphase ist mittlerweile weitestgehend abgeschlossen. Das Ziel ist jetzt, Methoden der ganzzahligen Optimierung weiterzuentwickeln, die sich in der Planung von einzelnen Netzschichten bewährt haben, um die entwickelten Modelle approximativ lösen zu können und so entsprechende Möglichkeiten zur Kostenreduktionen aufzeigen zu können.

Optimierung in der Telekommunikation: Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Hans-Florian Geerdes, Gunnar Klau, Thorsten Koch, Arie Koster

Förderung: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekt B4

UMTS ist ein neuer Standard zur Mobilkommunikation. UMTS-Netze werden derzeit

in vielen Ländern Europas aufgebaut und kommerziell eingeführt. Gegenüber dem etablierten GSM kann UMTS mit höheren Datenübertragungsraten ein breiteres Angebot an Daten- und Kommunikationsdiensten unterstützen. Dies ist vor allem der eingesetzten W-CDMA Funktechnologie zu verdanken. Dabei werden viele Funksignale gleichzeitig auf 5 MHz breiten Frequenzbändern übertragen. Die Trennung der überlagerten Signale ist beim Empfänger aufgrund digitaler Signalkodierung möglich.

Das Ziel der Funknetzplanung ist, die erwartete Kundennachfrage nach verschiedenen Diensten auf möglichst effiziente Art befriedigen zu können. Die Dienste variieren in ihrem Kapazitätsbedarf sehr stark zwischen einigen kbit/s für SMS bis hin zu mehreren hundert kbit/s für Videotelephonie oder Multimedia-Streaming. Neben ausreichender Kommunikationskapazität soll ein Netz auch eine weitgehend lückenlose Abdeckung im Versorgungsgebiet liefern. Eine Eigenschaft der W-CDMA Funktechnologie ist jedoch, daß Abdeckung und Kapazität sich ggf. durch zu starke Signalüberlagerungen (Interferenzen) stark negativ beeinflussen können. Deshalb muss mögliche Interferenz schon im Planungsprozess kontrolliert und begrenzt werden.

Die im EU-Projekt MOMENTUM begonnene Arbeit zur Dimensionierung des UMTS-Funknetzwerks wird im Rahmen dieses Projektes fortgeführt [12, 15]. Das Ziel ist es, für die in der Praxis auftretenden Planungsprobleme *nachweisbar gute* Lösungen zu produzieren. Hierzu werden verschiedene Wege untersucht, die Komplexität dieses *large-scale*-Optimierungsproblems mit stochastischen Eingabedaten zu beherrschen. Dabei kann die Planung und Analyse sowohl auf den Mittelwerten der Verkehrsintensität als auch auf „Momentaufnahmen“ durchgeführt werden.

Im Berichtszeitraum wurden die Ansätze aus MOMENTUM zur Optimierung auf der Basis der Momentaufnahmen weiterentwickelt. Insbesondere wurden Techniken zur Reduktion der Modellgröße (Kompression von Momentaufnahmen) entwickelt [14], die auf neuen Verfahren zur Netzlast- und Interferenzanalysen basieren, vgl. Abbildung 2.37. Mit Hilfe dieser Verfahren sind gleichfalls neue Verfahren zu Netzplanung auf der Basis der mittleren Verkehrslasten entwickelt worden.

Der im MOMENTUM-Projekt programmierte JAVA-Prototyp wurde weiterentwickelt. Insbesondere die Art und der Umfang der Analysen zur Netzqualität wurde erweitert. Weiterhin wurde das Engagement in dem internationalen Verbund COST 273⁷ fortgesetzt. Wesentliche Beiträge wurden zur Aufbereitung von Referenzdaten (MORANS) zur Planung und Analyse von Funknetzen geleistet.

Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly, *Cost-efficient network synthesis from leased lines*, Annals of Operations Research **76** (1998), 1–20.
- [2] A. Bley, *A Lagrangian Approach for Integrated Network Design and Routing in IP Networks*, Tagungsband zur „International Network Optimization Conference

⁷<http://www.lx.it.pt/cost273>

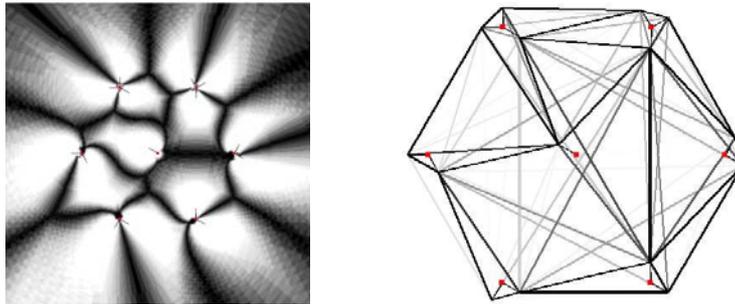


ABBILDUNG 2.37: Zwei verschiedene Darstellungen der Interferenz zwischen den Funkzellen eines synthetischen UMTS-Netzes. In der linken, flächigen Darstellung stellen dunkle Bereiche Problemzonen hinsichtlich Interferenzzerzeugung und -empfindlichkeit dar. Für die Optimierung lässt sich diese Information zu einer Kopplungsmatrix zusammenziehen, deren Einträge in der rechten Abbildung gleichfalls durch Helligkeitsintensität dargestellt sind.

(INOC) 2003“, Evry/Paris, Frankreich, Oktober 2003, 107–113, auch als Report 03–29, ZIB, 2003.

- [3] A. Bley, M. Grötschel und R. Wessäly, *Design of broadband virtual private networks: Model and heuristics for the B-WiN*, Robust Communication Networks: Interconnection and Survivability, Band 53, *DIMACS Series*, 1–16. ISBN 0-8218-1546-6, 2000.
- [4] A. Bley und T. Koch, *Optimierung in der Planung und beim Aufbau des G-WiN*, DFN-Mitteilungen, Nr. 54, 13–15, 2000, auch als Report 00–48, ZIB, 2000.
- [5] A. Bley und T. Koch, *Integer Programming Approaches to Access and Backbone IP-Network Planning*, Report 02–41, ZIB, 2002.
- [6] A. Bley, A. M. C. A. Koster, A. Kröller, R. Wessäly und A. Zymolka, *Kosten- und Qualitätsoptimierung in Kommunikationsnetzen*, Tele-Kommunikation Aktuell 07/08, 2003, auch als Report 03–31, ZIB, 2003.
- [7] A. Bley und A. Zymolka, *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*, Tagungsband zum „Achten Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“, Kassel, November 2003, 61–77, auch als Report 03–29, ZIB, 2003.
- [8] A. Brandt und M. Brandt, *On the sojourn times for many-queue head-of-the-line processor-sharing systems with permanent customers*, *Mathematical Methods of Operations Research* **47** (1998), 181–220.
- [9] ———, *A sample path relation for the sojourn times in G/G/1 – PS systems and its applications*, Report 03–18, ZIB, 2003.

-
- [10] L. M. Correia (Hrsg.), *Wireless Flexible Personalized Communications – COST 259: European Co-operation in Mobile Radio Research*, COST Action 259 – Final Report, John Wiley & Sons, 2001.
- [11] A. Eisenblätter, *Frequency assignment in GSM networks: Models, heuristics, and lower bounds*, Dissertation, TU Berlin, Fakultät 2, 2001.
- [12] A. Eisenblätter, E. R. Fledderus, A. Fügenschuh, H.-F. Geerdes, B. Heideck, D. Junglas, T. Koch, T. Kürner und A. Martin, *Mathematical methods for automatic optimisation of UMTS radio networks*, Bericht D43, MOMENTUM IST-2000-28088, 2003.
- [13] A. Eisenblätter, A. Fügenschuh, H.-F. Geerdes, T. Koch und R. Wessäly, *Software prototype*, Bericht D45, MOMENTUM IST-2000-28088, 2003.
- [14] A. Eisenblätter, A. Fügenschuh, H.-F. Geerdes, D. Junglas, T. Koch und A. Martin, *Integer programming methods for UMTS radio network planning*, Tagungsband zum „Workshop on Modeling and Optimization in Mobile, Ad-Hoc and Wireless Networks“, Cambridge, Großbritannien, März 2004.
- [15] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, D. Junglas, T. Koch, T. Kürner und A. Martin, *Final report on automatic planning and optimisation*, Bericht D47, MOMENTUM IST-2000-28088, 2003.
- [16] A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequency assignment and ramifications of coloring*, *Discussiones Mathematicae Graph Theory* **22** (2002), 51–88.
- [17] A. Eisenblätter und A. M. C. A. Koster, *FAP web*, 2000, <http://fap.zib.de>.
- [18] M. Grötschel, C. Monma und M. Stoer, *Design of survivable networks*, Band Network Models, Reihe *Handbooks in Operations Research and Management Science*, Kapitel 10, 617–672, North-Holland, 1995.
- [19] H. Holma und A. Toskala, *WCDMA for UMTS*, John Wiley & Sons Ltd., 2001.
- [20] IST-2000-28088 MOMENTUM Project, *Models and simulations for network planning and control of UMTS*, 2001, <http://momentum.zib.de>.
- [21] IST-2000-28088 MOMENTUM Project, *MOMENTUM public UMTS planning scenarios*, 2003, <http://momentum.zib.de>.
- [22] A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment - Models and Algorithms*, Dissertation, Universität Maastricht, 1999, <http://www.zib.de/koster/thesis.html>.

- [23] A. Koster und A. Zymolka, *Minimum Converter Wavelength Assignment in All-Optical Networks*, Tagungsband zur „8th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)“, Gent, Belgien, Februar 2004, 517–535, auch als Report 03–45, ZIB, 2003.
- [24] A. Koster, A. Zymolka, M. Jäger, R. Hülsermann und C. Gerlach, *Demand-wise Shared Protection for Meshed Optical Networks*, Tagungsband zum „Forth International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks (DRCN)“, Banff, Kanada, Oktober 2003, 85–92, auch als Report 03–24, ZIB, 2003.
- [25] A. Kröller und R. Wessäly, *Integrated Optimization of Hardware Configuration and Capacity Dimensioning in SDH and Opaque WDM Networks*, Report 03–49, ZIB, 2003.
- [26] J. Laiho, A. Wacker und T. Novosad (Hrsg.), *Radio network planning and optimization for UMTS*, John Wiley & Sons Ltd., 2001.
- [27] S. Orłowski und R. Wessäly, *Comparing Restoration Concepts using Optimal Network Configurations with Integrated Hardware and Routing Decisions*, Tagungsband zum „Forth International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks (DRCN)“, Banff, Kanada, Oktober 2003, 15–22, auch als Report 03–09, ZIB, 2003.
- [28] M. Stoer, *Design of Survivable Networks*, Lecture Notes in Mathematics, Band 1531, Springer, 1992.
- [29] R. Wessäly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Dissertation, TU Berlin. Cuvillier Verlag, ISBN 3-89712-864-0, 2000.
- [30] A. Zymolka, A. Koster und R. Wessäly, *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*, Tagungsband zur „7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)“, Budapest, Ungarn, Februar 2003, 61–80, auch als Report 02–34, ZIB, 2002.

2.2.9 Ganzzahlige Optimierung

Die Ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, in denen Güter oder Entscheidungen unteilbar sind. Ein Mitarbeiter kann einem Projekt entweder zugeteilt werden oder nicht, für Datenleitungen in der Telekommunikation stehen nur bestimmte diskrete Kapazitätsstufen wie 64 KBit, 2 MBit, 34 MBit usw. zur Auswahl, ein Speditionsunternehmen kann sich nicht 3,7 neue LKW anschaffen.

Viele Probleme aus Bereichen wie z. B. Telekommunikation, Verkehr oder Chip-Entwicklung lassen sich als sogenannte *Gemischt-Ganzzahlige Programme* (mixed integer programs, MIPs) formulieren.

Auf Grund der vielfältigen Probleme und der Dynamik der technischen Entwicklung wird es zunehmend wichtig, neue Problemstellungen in einfacher Weise modellieren und akzeptable Lösungen schnell finden zu können.

Aber gerade weil sich immer mehr Probleme als MIP modellieren lassen, werden die Anforderungen an die Lösungsalgorithmen immer größer. Im Schwerpunkt *Ganzzahlige Optimierung* wird derzeit hauptsächlich versucht die grundlegenden Lösungsalgorithmen zu verbessern um MIPs möglichst mittels eines allgemeinen von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus lösen zu können.

In 2003 wurde begonnen die Basis dafür zu schaffen, vermehrt auch mit Unzulässigkeit umgehen zu können. Bisläng sind unzulässige Probleme und solche, die sich am Rand der Unzulässigkeit befinden, sehr problematisch. Diese Fälle werden innerhalb des Schwerpunkts in Zukunft mehr Beachtung finden, da sich zunehmend praxisrelevante Anwendungen abzeichnen.

In diesem Rahmen ordnen sich die Projekte des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* wie folgt ein:

- *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*
verbessert die Algorithmen zur allgemeinen Lösung von MIPs.
- *MIPLIB*
ist eine Bibliothek mit Testinstanzen für MIP-Löser.
- *Modellierungssprache Zimpl*
beschleunigt die Umsetzung vom mathematischen Modell zum MIP.
- *Ganzzahlige Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme*
erforscht die kombinatorische Struktur verschiedener 0-1-Probleme um die Lösbarkeit von MIPs mit binären Variablen zu verbessern.
- *Kombinatorische Relaxierungen*
leiten aus speziellen Problemen Verallgemeinerungen ab.
- *Basisverifizierer perPlex*
erlaubt es exakte Optimallösungen von linearen Programmen zu bestimmen.
- *Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen*
stellt die Anwendung dar, bei der alles bisherige Wissen benötigt wird, um den Herausforderungen gerecht zu werden.

Gemischt-Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Tobias Achterberg, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt)

Der bisher erfolgreichste Ansatz zur Lösung von Gemischt-Ganzzahligen Programmen (MIPs) besteht im Einsatz eines sogenannten *Branch-and-Cut*-Verfahrens unter Verwendung der LP-Relaxierung. Dabei werden die Ganzzahligkeitsbedingungen zu-

nächst ignoriert, so dass sich das MIP zu einem *Linearen Programm* (LP) vereinfacht. Aus der Lösung dieser LP-Relaxierung wird anschließend die Ganzzahligkeit unter Verwendung von Schnittebenen (Cuts) sowie einer impliziten Enumeration durch Branch-and-Bound wiederhergestellt.

Das Branch-and-Bound-Verfahren wird auch in Algorithmen des Constraint Programming (CP) eingesetzt, um das gegebene Problem sukzessive in kleinere Teilprobleme zu zerlegen und auf diese Weise zu lösen. Zur Beschränkung des Suchraums und zur Vermeidung der expliziten Enumeration aller potentiellen Lösungen verwendet man aber keine LP-Relaxierungen und Schnittebenen. Stattdessen werden in den Teilproblemen die Wertebereiche der Variablen mittels Inferenz eingeschränkt (Constraint Propagation), sowie zusätzliche abgeleitete Nebenbedingungen hinzugefügt. Letzteres entspricht den Schnittebenen des MIP, ist in seiner Anwendung aber nicht wie MIP auf lineare Nebenbedingungen beschränkt.

Durch Integration von MIP- und CP-Techniken erhofft man sich, die flexiblere Modellierungsart des CP mit den effizienten, auf die spezielle Problemstruktur zugeschnittenen Lösungsmethoden des MIP zu kombinieren. Insbesondere kann das Behandeln numerisch schwieriger Nebenbedingungen durch CP dabei helfen, die Stabilität der unterliegenden Linearen Programme zu verbessern.

Mit Hilfe der Vorlage des am ZIB entwickelten MIP-Lösers SIP [8] wurde im Berichtsjahr das Framework SCIP implementiert, das die Integration von MIP und CP realisiert. Mit SCIP entwickelte Algorithmen können auf einfache Weise von den komplementären Stärken beider Techniken profitieren. Die implementierten Komponenten erlauben es bereits, das Framework als MIP- und als SAT-Löser einzusetzen.

MIPLIB 2003

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Tobias Achterberg

Kooperationspartner: Alexander Martin, Technische Universität Darmstadt

Um den Bedarf der Forscher nach Zugriff auf interessante gemischt-ganzzahlige lineare Programme (MIP or Mixed Integer Program) zu bedienen, erzeugten R. E. Bixby, E. A. Boyd und R. R. Indovina 1992 die MIPLIB, eine Bibliothek elektronisch verfügbarer Probleme. Durch die Fortschritte bei den MIP-Lösern wurde es später notwendig, die Bibliothek zu überarbeiten, obsolet gewordenen Probleme zu entfernen und neue, schwierigere hinzuzufügen. Dies wurde 1996 von R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal und M. W. P. Savelsbergh durchgeführt.

Die MIPLIB ist inzwischen zu einem Standard-Test-Set für den Vergleich von MIP-Lösern geworden.

Inzwischen sind 7 Jahre seit der letzten Aktualisierung vergangen und wieder werden durch die Fortschritte bei den MIP-Lösern, wie auch bei den Computern selbst, viele Beispiele nun so schnell und problemlos gelöst, dass sie für die Forschung keine Herausforderung mehr darstellen.

In Absprache mit den bisherigen Betreuern ist die MIPLIB an das ZIB gekommen und wird hier unter der neuen Adresse <http://miplib.zib.de> überarbeitet und betreut.

Es wurde nahezu die Hälfte der Instanzen ausgetauscht und durch neue schwierigere ersetzt. Derzeit ist die MIPLIB 2003 vorläufig fertiggestellt und wird von Kollegen in aller Welt geprüft. Wir hoffen in 2004 die neue Version offiziell verabschieden zu können.

Ganzzahlige Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme

Bearbeitet von: Arie Koster, Adrian Zymolka

Die Erforschung der kombinatorischen Struktur verschiedener 0-1-Probleme hat zu Resultaten geführt, die bei der Lösung allgemeiner ganzzahliger linearer Programme mit binären Variablen hilfreich eingesetzt werden können. Ein plakatives Beispiel dafür stellen stabile Mengen in Graphen dar. Eine stabile Menge ist eine Menge paarweise nicht benachbarter Knoten des Graphen. Durch die Untersuchung des Stabile-Mengen-Polytops wurden verschiedene Ungleichungen (vgl. [5]) identifiziert, die auch für zahlreiche weitere ganzzahlige lineare Programme gültige Bedingungen darstellen. So werden beispielsweise Clique-Ungleichungen von heutigen Lösern standardmäßig erkannt und – sofern geeignet – eingesetzt. Sobald die binären Variablen jedoch in ganzzahlige Größen übergehen, haben die Löser Schwierigkeiten, ähnliche zugrundeliegende Strukturen zu erkennen und auszunutzen. In diesem Projekt beschäftigen wir uns daher mit ganzzahligen Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme.

Im Berichtszeitraum haben wir stabile Multimengen, eine ganzzahlige Verallgemeinerung stabiler Mengen, betrachtet. Anstelle der 0-1-Entscheidung bei der Knotenwahl können bei stabilen Multimengen Knoten mehrfach gewählt werden, sofern gegebene Schranken auf den Kanten dadurch nicht überschritten werden (vgl. [6]). Im linearen Programm treten dann ganzzahlige Variable an die Stelle der für stabile Mengen verwendeten binären Variablen. Aus der theoretischen Analyse des Stabile-Multimengen-Polytops konnten zwei Klassen gültiger Ungleichungen abgeleitet werden, die ganzzahlige Verallgemeinerungen der Kreis- sowie der Clique-Ungleichungen für stabile Mengen darstellen. Insbesondere konnte die polynomiale Separierbarkeit der Kreisungleichungen bewiesen und ein dafür geeigneter Algorithmus entwickelt werden [7]. Dies ermöglicht den effizienten Einsatz dieser Ungleichungen im Rahmen von Schnittebenenverfahren, deren Performancesteigerung in einer Rechenstudie belegt wurde.

Kombinatorische Relaxierungen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer

Wir untersuchen in diesem Projekt Relaxierungen von kombinatorischen Optimierungsproblemen, die durch eine „polyedrische Einbettung“ eines kombinatorischen Optimierungsproblems in ein anderes Problem entstehen. Mit solchen „kombinatorischen Relaxierungen“ lassen sich Ungleichungen, Separierungs- und Optimierungs-

algorithmen von einem Problem auf ein anderes übertragen.

Wir arbeiten an der Anwendung dieser Techniken auf eine Klasse von kombinatorischen Optimierungsproblemen vom Packungstyp. Diese Probleme besitzen eine kanonische Set-Packing-Relaxierung, die man durch eine Dantzig-Wolfe-Dekomposition des Problems erhält. Diese Formulierung erlaubt die Untersuchung kombinatorischer Packungsprobleme als Stabile-Mengen-Probleme. Man kann auf diese Weise z. B. eine vollständige polyedrische Beschreibung allgemeiner kombinatorischer 2-Packungsprobleme gewinnen.

Kombinatorische Relaxierungen werden in [1, 2] und [3, 4] diskutiert.

Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen

Bearbeitet von: Tobias Achterberg, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Infineon Technologies AG; Wolfgang Kunz, Dominik Stoffel (Technische Universität Kaiserslautern)

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

In der Chipherstellung besteht ein großer Anteil der Entwicklungsarbeit aus der Validierung des Schaltungsentwurfs und der verschiedenen Zwischenergebnisse auf dem Weg zum ersten Prototypen des Chips. Als Alternative zur Fehlerprüfung durch Simulation gewinnt die Technik des formalen Beweisens bestimmter Eigenschaften der Schaltung zunehmend an Bedeutung.

Während der Entwicklung eines Chips durchläuft der Schaltungsentwurf verschiedene Darstellungsebenen. Beginnend mit der Spezifikation der Schaltung in einer Hardware-Beschreibungssprache wie z. B. Verilog oder VHDL wird der Entwurf umgesetzt in die sogenannte Register-Transfer-Ebene, aus der eine Darstellung auf Gatter-Ebene und schließlich auf Transistor-Ebene erzeugt wird.

Bisherig verwendete Techniken zum formalen Beweisen einer Eigenschaft operieren auf Gatterebene. Die Gatternetzliste wird gemeinsam mit der zu prüfenden Eigenschaft in ein „Satisfiability“-Problem (SAT) transformiert, so dass dieses mit herkömmlichen SAT-Algorithmen gelöst werden kann. Dieser Ansatz stößt aber insbesondere bei Schaltungen, die arithmetische Operationen implementieren, auf Komplexitätsprobleme.

In der vom ZIB bearbeiteten Teilaufgabe des BMBF-Projektes „Valse-XT“ werden Beweistechniken auf einer höheren Ebene, nämlich der Register-Transfer-Ebene, entwickelt und implementiert. Auf dieser Ebene sind die Register nicht vollständig in Bits aufgelöst, sondern werden als ganze Zahlen entsprechender Bitbreite behandelt. Das Ziel ist es, auf diese Weise strukturelle Eigenschaften der Schaltung für den Beweis einer Eigenschaft besser auszunutzen, um so auch Schaltungen mit für SAT-Löser schwierigen arithmetischen Operationen der formalen Eigenschaftsverifikation zugänglich zu machen.

Das Verifikationsproblem auf Register-Transfer-Ebene wird als Constraint Program

(CP) modelliert und mit einer Kombination aus Mixed Integer Programming (MIP) und Constraint Programming gelöst. Dazu wird das am ZIB entwickelte Framework „SCIP“ zur Lösung von Constraint-Integer-Programmen eingesetzt.

SteinLib Testdata Library

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Technische Universität Darmstadt, Technische Universität Braunschweig

Das Steinerbaumproblem in Graphen lässt sich wie folgt formulieren: In einem Graphen $G = (V, E, c)$ mit einer Knotenmenge V , einer Kantenmenge E und Kantengewichten c_e sowie einer Menge $T \subseteq V$ von ausgezeichneten Terminals wird ein T aufspannender Subgraph von G minimalen Gewichts gesucht. Hierbei sind auch Varianten möglich, z. B. das Steinerarborezensproblem, bei dem in einem gerichteten Graphen $G = (V, A, c)$ eine T aufspannende Arborezens mit Wurzel $r \in T$ gesucht wird.

Beim Gruppensteinerbaumproblem sind disjunkte Mengen $T_i \subseteq V$ gegeben; die Lösung ist ein aufspannender Baum in G , der mindestens einen Knoten aus jedem T_i enthält. Weitere Varianten sind Steinerbaumprobleme mit Längenbeschränkung oder das kostensammelnde Steinerbaumproblem. Ebenso kann das Problem eingeschränkt sein, wenn z. B. der zugrundeliegende Graph ein Gittergraph ist. Das Steinerbaumproblem in Graphen ist wie die meisten seiner Varianten (insbesondere aller hier genannten) NP-schwer.

Die von uns eingerichtete und online unter <http://elib.zib.de/steinlib> abrufbare Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen wird beständig aktualisiert und erweitert.

Es hat sich gezeigt, dass, wie erhofft, eine zunehmende Zahl von Veröffentlichungen darauf Bezug nimmt.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998. Shaker Verlag, 1998.
- [2] R. Borndörfer, *Combinatorial Packing Problems*, Report 03–03, ZIB, 2003.
- [3] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*, *Mathematical Programming* **88** (2000), 425–450.
- [4] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Discrete Relaxations of Combinatorial Programs*, *Discrete Applied Mathematics* **112** (2001), Nr. 1–3, 11–26.
- [5] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998.

- [6] A. Koster und A. Zymolka, *Stable multi-sets*, Math. Meth. Oper. Res. 56 (2002), 45–65.
- [7] A. Koster und A. Zymolka, *Polyhedral investigations on stable multi-sets*, Report 03–10, ZIB, 2003.
- [8] A. Martin, *Integer Programs with Block Structure*, Habilitationsschrift, TU Berlin, 1998.
- [9] ILOG CPLEX Division, 889 Alder Avenue, Suite 200, Incline Village, NV 89451, USA. *ILOG CPLEX 8.0 Reference Manual*.

2.2.10 Online-Optimierung

Im Gegensatz zur klassischen Optimierung geht man in der *Online-Optimierung* davon aus, dass nicht sämtliche Daten eines Problems vorab bekannt sind. Somit müssen Entscheidungen auf der Basis unvollständigen Wissens getroffen werden. Die Eingabe wird als eine (endliche) *Anfragefolge* $\sigma = r_1, r_2, \dots$ modelliert, die einem Online-Algorithmus stückweise offenbart wird. Nach dem Bekanntwerden der Anfrage r_i muss ein Online-Algorithmus eine Entscheidung über seine weitere Arbeitsweise treffen, ohne die Anfragen r_{i+1}, r_{i+2}, \dots zu kennen. Die Entscheidungen des Online-Algorithmus sind je nach Problem zusätzlichen Einschränkungen unterworfen. Eine wichtige Rolle in der Entwicklung von praxistauglichen Online-Algorithmen spielen *Echtzeit-Anforderungen*: der Algorithmus muss innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern. Innerhalb dieses Schwerpunktes sind zwei Projekte des DFG-Forschungszentrums „Mathematik für Schlüsseltechnologien“ angesiedelt.

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich in den letzten Jahren die von Sleator und Tarjan [19] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [4, 7]). Der Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung wird mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung verglichen. Ein Algorithmus heißt *c-kompetitiv*, wenn für jede Eingabe seine „Kosten“ höchstens c -mal so groß wie die eines optimalen Offline-Algorithmus sind. Die kompetitive Analyse bringt jedoch einige Nachteile mit sich. Die Modifikation und Erweiterung der kompetitiven Analyse und die Entwicklung geeigneter anderer Bewertungskriterien ist ein aktuelles Forschungsthema in der Online-Optimierung [2, 5, 6], dem wir uns im Projekt „Kombinatorische Online-Planung“ widmen.

Eine wichtiges Anwendungsgebiet der Online-Optimierung sind Planungsprobleme im Transportwesen und der innerbetrieblichen Logistik. Transportsysteme sind in der Regel nicht im voraus (offline) zu optimieren, da zukünftige Transportaufträge beispielsweise für Lastenaufzüge oder Bediengeräte von Hochregallagern nicht bekannt sind und ausfallbedingte Staus nur selten rechtzeitig vorausgesehen werden. Lange Rechenzeiten verringern den Durchsatz im System, so dass verwendete Online-Algorithmen insbesondere auch Echtzeit-Anforderungen genügen müssen.

Logistische Systeme sind oft modular aufgebaut. Es ist manchmal möglich, die Gütegarantien für die einzelnen Komponenten des Systems auf das Gesamtsystem zu übertragen. Dies wird im Projekt „Modellierung, Analyse und Simulation von modularen Echtzeit-Systemen“ untersucht.

Online-Transportaufgaben mit Echtzeit-Anforderungen treten auch bei der Planung von Einsatzfahrzeugen auf, wie etwa bei der Zuordnung von Pannenhelfern zu liegengebliebenen Kraftfahrzeugen. Da künftige Pannenorte im allgemeinen unbekannt sind, muss eine Planung auf Basis bekannter Daten strategisch gute Entscheidungen liefern, die Engpässe in der Zukunft vermeiden (siehe Projekte „Online-Disposition von Fahrzeugen“ und „Online-Einsatzplanung von Service-Technikern“).

Ein möglicher Ansatz zur Lösung dieser Probleme ist die Verwendung von Reoptimierungsalgorithmen. Bei jeder Änderung des Systemzustands wird ein Offline-Optimierungsproblem mit den zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Daten gelöst. Welches Offline-Optimierungsproblem man dazu heranziehen sollte, wird in Projekt „Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung“ erforscht.

In der Telekommunikation spielt der Online-Aspekt ebenfalls eine wichtige Rolle. Hier ergeben sich Anwendungen beim Routing von neuen Verbindungsanfragen und bei der Rekonfiguration des Netzes nach Ausfallsituationen. Für die Berechnung einer neuen Netzkonfiguration steht nur eine sehr kurze Zeitspanne zur Verfügung, so dass auch hier die Echtzeitanforderung greift (siehe Projekt „Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze“).

Kombinatorische Online-Planung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Sven O. Krumke, Jörg Rambau

Förderung: DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“

Ein häufig verwendetes Online-Modell erfordert von einem Online-Algorithmus eine unmittelbare und unwiderrufliche Entscheidung nach jeder neuen Anfrage (Sequenzmodell). Für *Planungsprobleme* (Aufzugsteuerung, Steuerung von Regalbediengeräten und anderen Materialtransportsystemen) ist jedoch das folgende, bislang wenig untersuchte Modell aussagekräftiger: Jede Anfrage ist mit einem Zeitstempel versehen, der den Zeitpunkt markiert, zu dem die Anfrage dem Online-Algorithmus bekannt wird. Somit ist es auch möglich, Anfragen zu „sammeln“ und ihre Abarbeitung zu planen (Zeitstempelmodell).

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich in den letzten Jahren die von Sleator und Tarjan [19] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [4, 7]). Der Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung wird mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung verglichen. Ein Algorithmus heißt *c-kompetitiv*, wenn für jede Eingabe seine „Kosten“ höchstens c -mal so groß wie die des optimalen Offline-Algorithmus sind.

Eine Unzulänglichkeit der kompetitiven Analyse besteht darin, dass der zugrundelie-

gende theoretisch schlimmste Fall in der Praxis häufig sehr unwahrscheinlich oder sogar ausgeschlossen ist. Die kompetitive Analyse ist sehr pessimistisch. Oft ist ein optimaler Offline-Algorithmus derart durch seine vollständige Information bevorteilt, daß nur nahezu triviale Kompetitivitätsaussagen beweisbar sind (vgl. *triviality barrier* in [7]). Durch Einschränkungen für die möglichen Eingaben oder zusätzliche Restriktionen auf die Arbeitsweise des Offline-Algorithmus kann man versuchen, die kompetitive Analyse weniger pessimistisch zu machen [3, 16]. Allerdings helfen auch diese Modifikationen nicht immer, um eine gute Entscheidungshilfe bei der Auswahl eines für die Praxis geeigneten Algorithmus zu erhalten.

Wir möchten in diesem Projekt Grundlagenforschung für die Konstruktion und die Analyse von Online-Algorithmen betreiben. Ziel ist es, den übermäßigen Pessimismus der klassischen kompetitiven Analyse (*dem* „Standard-Mittel“ zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen) teilweise zu beheben und aussagekräftigere Beurteilungen für Algorithmen herzuleiten. Dabei stehen drei Themengebiete im Vordergrund:

- die Analyse von randomisierten Algorithmen
- die Analyse von Algorithmen bei zufälliger Eingabe
- die Analyse von Algorithmen bei strukturell beschränkter Eingabe

Ein zentrales Problem, an dem wir unsere Konzepte entwickeln und verifizieren wollen, ist das Online Dial-a-Ride-Problem (OLDARP), bei dem Objekte in einem metrischen Raum mit Hilfe eines oder mehrerer Server transportiert werden müssen.

Auf dem Weg zu „probabilistischen Kompetitivitätsresultaten“ war unser erstes Ziel, die Struktur des Problems besser zu verstehen. Dazu wurden im letzten Jahr probabilistische Ergebnisse zum assoziierten Offline-Problem erarbeitet. Ergebnisse über die polynomiale Lösbarkeit des (Offline-)DARP sind auch für bereits bestehende Online-Algorithmen [1] von Bedeutung, da diese wiederholt Instanzen des DARP lösen, um ihre (Online-)Entscheidungen zu treffen.

Das Dial-a-Ride-Problem DARP besteht aus einem Graphen $G = (V, E)$ und einer Menge L von Knotenpaaren, die eine Folge von Transportaufträgen darstellen. Gesucht ist eine möglichst kurze Tour über Kanten von G , die die Aufträge aus L miteinander verbindet. DARP ist bereits auf einfachen Graphenklassen wie Bäumen NP-schwer [13]. Wir betrachten das folgende Zufallsmodell: Die Eingabe besteht aus einem Baum mit beliebigen Kantenlängen sowie einer Zufallsverteilung $(p_v)_{v \in V}$ auf den Knoten v des Baumes – und ein Knotenpaar u, v wird nun mit Wahrscheinlichkeit $p_u p_v$ in die Liste L aufgenommen. Wir konnten in [6, 5] einen Algorithmus angeben und zeigen, dass dieser mit hoher Wahrscheinlichkeit eine optimale Tour findet. Dieses Ergebnis ist umso stärker, als man die Optimalität der vom Algorithmus gelieferten Lösung effizient verifizieren kann.

In [17] untersuchten wir die Problemstellung, beim OLDARP möglichst viele Aufträge rechtzeitig, d. h. vor ihren spezifizierten Deadlines, fertigzustellen. Dabei konnten wir

neue Algorithmen entwickeln, die bessere Gütegarantien besitzen als die bisher in der Literatur bekannten. Für einige Spezialfälle sind unsere Algorithmen aus [17] die ersten Online-Algorithmen mit beweisbarer Güte. Mit Hilfe unserer Techniken aus [15] konnten wir ergänzend neue untere Schranken für die Leistungsfähigkeit von randomisierten Algorithmen herleiten.

Modellierung, Analyse und Simulation von modularen Echtzeit-Systemen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Sven O. Krumke, Tjark Vredeveld

Kooperationspartner: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekte C5, C6

Förderung: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekt C3

Zahlreiche Optimierungsprobleme besitzen eine modulare Struktur und lassen sich in kleinere Teilprobleme zerlegen. Beispielsweise sind innerbetriebliche Logistiksysteme aus einzelnen Komponenten wie Hochregallagern, Aufzügen usw. zusammengesetzt. Zwar sind bisher erfolgreich Algorithmen und analytische Methoden für die Evaluierung von einzelnen Komponenten entwickelt worden, leider ist jedoch wenig über die Wechselwirkung von heterogenen Komponenten in komplexen Systemen bekannt.

Das Ziel des Projekts ist es, vorhandene modulare Strukturen auszunutzen, um neue Gütegarantien für komplexe Online-Algorithmen zu gewinnen. Eine zentrale Fragestellung ist dabei, ob und wie sich Gütegarantien für die einzelnen Module auf das Gesamtsystem übertragen lassen. Im Fokus der Forschung stehen kombinatorische Optimierungsprobleme aus dem Transport- und Logistikbereich.

Auf der theoretischen Seite sollen im Rahmen des Projekts Erweiterungen und Alternativen zur kompetitiven Analyse entwickelt werden, die modulare Strukturen zulassen. Ergänzend dazu sollen durch Simulation wichtige Entscheidungshilfen für die Praxis gewonnen werden.

Im letzten Jahr wurde eine neue Alternative zur kompetitiven Analyse für die einzelnen Module entwickelt: die *Smoothed Competitive Analyse* [2]. Sie ist eine Mischung zwischen *Worst-Case-* und *Average-Case-Analyse*. Des Weiteren konnte anhand der sogenannten *verteilten kompetitiven Analyse* gezeigt werden, dass für ein k -Server Dial-a-Ride-Problem mit dem Ziel die Anzahl bearbeiteter Anfragen zu maximieren, die Gütegarantie eines Algorithmus für die einzelnen Module auf einen Algorithmus für das Gesamtsystem übertragbar ist [17].

Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Jörg Rambau, Andreas Tuchscherer

Kooperationspartner: eCom Logistik (Berlin), Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e. V. (ADAC), T-Systems Nova, Hermes Technischer Kundendienst, DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekte C3, C5, C7, F4

Förderung: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Teilprojekt C6

Viele logistische Systeme in der Produktionsplanung erfordern eine verlässliche Online-Steuerung. Eine spezielle Klasse von Online-Algorithmen wird in diesem Projekt anhand von Beispielpunkten aus der innerbetrieblichen Logistik untersucht: die *Reoptimierungsalgorithmen*. Bei jeder Änderung des Systemzustands wird ein Offline-Optimierungsproblem (im folgenden kurz *Hilfsproblem*) mit den zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Daten gelöst. Diese Lösung wird dann bis zur nächsten Änderung des Systemzustands zur Steuerung verwendet. Das verwendete Hilfsproblem kann zum Beispiel die Offline-Version des Original-Online-Optimierungsproblems sein (*Standard-Hilfsproblem*): man optimiert unter den gleichen Nebenbedingungen dieselbe Zielfunktion wie im Online-Problem, benutzt aber nur die jeweils verfügbaren Input-Daten. Dieses kann zu unerwünschten Ergebnissen führen [12].

Ziel dieses Projektes ist es zu untersuchen, wie man zu einem Online-Optimierungsproblem besser geeignete Hilfsprobleme entwerfen kann, z. B. um stabileres Online-Verhalten zu erzeugen. Wir vermuten, dass Hilfsprobleme mit geringer Sensitivität geeignet sind.

Wir können nun ein Paletten-Fahrstuhlssystem mit mehreren Fahrstühlen mit Hilfe eines integrierten (Aufzugs-Zuordnung und Auftrags-Reihenfolgeplanung) Reoptimierungsalgorithmus in Echtzeit steuern. Der Algorithmus basiert auf dem Fahrzeug-Einsatzplanungs-Verfahren aus dem Projekt *Online-Disposition von Fahrzeugen* [11, 18], beachtet aber zusätzliche Nebenbedingungen. Dabei kann der Reoptimierungsalgorithmus bis zu 7 Aufträge pro Aufzug bei 5–10 Aufzügen innerhalb einer Sekunde i. d. R. optimal (oder beweisbar fast optimal) verplanen, und das bzgl. fast jeder gewichteten Kostenfunktion aus Verspätungs- und Leerfahrtzeiten. (Bislang werden bei solchen Steuerungen die Zuordnung der Aufträge auf die Fahrstühle und die Reihenfolgeplanung der einzelnen Fahrstühle i. d. R. separiert behandelt.) Dieser Algorithmus ist mittlerweile als Modul in unsere Simulationsumgebung für Fahrstuhlsteuerungen eingepasst worden.

Es hat sich in ausgiebigen Simulationsstudien gezeigt, dass in diesem speziellen Fall Reoptimierung bzgl. des Standard-Hilfsproblems tatsächlich die besten Ergebnisse liefert: Reoptimieren wir die Gesamt-Leerfahrtzeit eines Plans, so sind in der Tat die Gesamt-Leerfahrtzeiten über einen längeren Zeithorizont kürzer; reoptimieren wir durchschnittliche Verspätung, so sinkt auch die langfristige durchschnittliche Verspätung. Zu diesem Thema ist bereits eine Diplomarbeit verfasst worden.

Durch das Projekt *Online-Tourenplanung für Service-Techniker* in Zusammenarbeit mit Hermes Technischer Kundendienst sind wir auf einen mathematisch ähnlichen Aufgabentyp gestoßen: die Online-Terminplanung mit nachgelagerter Optimierung (für weitere Informationen siehe den Bericht zum Projekt *Online-Tourenplanung für Service-Techniker*). Diese Aufgabe werden wir in Zukunft in diesem Projekt ebenfalls unter dem Gesichtspunkt der echtzeittauglichen Reoptimierungsalgorithmen untersu-

chen. Ein mittelfristiges Ziel ist die Ermittlung von Online-Gütegarantien.

Online-Disposition von Fahrzeugen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Sven O. Krumke, Jörg Rambau, Luis M. Torres

Kooperationspartner: Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e. V. (ADAC)

Das Ziel dieses Projektes ist es, ein Online-Dispatching-Verfahren zu entwickeln, das bei der Berechnung einer *Echtzeit*-Einsatzplanung für die Pannenhilfsfahrzeuge vom ADAC verwendet werden kann. Der ADAC verfügt über eine heterogene Flotte von mehr als 1.600 Fahrzeugen, deren geographische Position jederzeit mit Hilfe von GPS genau lokalisiert werden kann. In fünf über Deutschland verteilten regionalen Hilfezentralen werden Pannemeldungen angenommen und über die Disposition der Einsatzmittel (sowohl der ADAC-Flotte als auch externer Servicepartner) entschieden.

Dafür unterstützt das vorhandene *PANDA*-Computer-System den Disponenten mit Informationen über Position und Status der aktuellen Aufträge und der ADAC-Fahrzeuge. Ausgehend von diesen Informationen versucht der Disponent dann, einen Einsatzplan aufzustellen, der eine gute Service-Qualität garantiert (d. h. Wartezeiten von 20 bis 60 Minuten, je nach Lastzustand) und gleichzeitig möglichst geringe Betriebskosten verursacht. Diese Aufgabe ist schwierig, einerseits, weil die Berechnung eines solchen Einsatzplans mit global guter Qualität aus mathematischer Hinsicht ein komplexes Problem darstellt, andererseits, weil diese Berechnung in *Echtzeit* erfolgen muß, d. h. der Disponent hat nur wenig Zeit zum Entscheiden. Ferner besitzt das Problem *Online-Charakter*: Entscheidungen müssen ohne Kenntnis zukünftiger Pannemeldungen getroffen werden. Erweist sich eine Entscheidung später als ungünstig, so kann sie nur in begrenztem Maße revidiert werden.

Unser Verfahren wird seit Ende 2002 im praktischen Betrieb durch den ADAC eingesetzt. Dabei zeigte sich das Problem, dass häufig sogenannte *Preemptions* auftreten, also einmal getroffene Dispositionsentscheidungen revidiert werden. Das kann in ungünstigen Fällen zu einem ständigen Wechsel zwischen ähnlichen Dispositionen führen (*Flip-Flop-Verhalten*). Als Hauptursache zeigte sich, dass aufgrund der sehr kurzen Neuplanungszeit von ca. 10 Sekunden nicht immer die bessere Lösung gefunden wurde. Wir haben daraufhin das Verfahren so modifiziert, dass die vorherige (möglicherweise gute) Disposition beim Neuplanen geeignet berücksichtigt wird. Diese Maßnahme führte sofort zu einem Rückgang der *Preemptions*. Außerdem haben wir durch Simulationen auf realen Tagesdaten des ADAC gesehen, dass das völlige Verbot von *Preemptions* die Gesamtkosten für einen Tag um bis zu 25% erhöhen kann und stets zu teureren Tageslösungen führt als bei geringen Strafkosten pro *Preemption*.

Ein weiteres Problem im praktischen Betrieb stellt die Einbindung externer Servicepartner dar. Der ADAC änderte die ursprünglichen Anforderung dahingehend ab, dass die automatische Disposition zunächst eine Lösung *ohne* Einplanung der vorhandenen Partner berechnet und die Partnereinbindung dann manuell durch die Disponenten vorgenommen wird. In der mathematischen Modellierung hat jedoch die Möglichkeit der

Partnereinbindung eine wichtige Rolle gespielt, so dass wir unsere Modellierung überarbeiten mussten. Hinzu kam ein viel höheres Auftragsaufkommen als es die bislang untersuchten Daten gezeigt hatten.

Um diese Probleme in den Griff zu bekommen, entwickelten wir verschiedene *Hochlastvarianten* unseres Verfahrens, die ohne Partner gute Lösungen erzielen sollten. Kernidee war dabei, dass bei hohem Auftragsaufkommen eine langfristige Planung nicht besonders sinnvoll ist, da sich die Situation in der nächsten Zeit stark ändern kann. Daher bieten die Hochlastvarianten die Möglichkeit, *vorerst* auf die Einplanung einzelner (ungünstig einplanbarer) Aufträge zu verzichten, um so kurzfristig möglichst viele günstig gelegene Aufträge abzuarbeiten. Die Hochlastvarianten haben wir mittels unseres Simulationssystems evaluiert und klare Unterschiede feststellen können. Aufgrund dieser Ergebnisse haben wir dem ADAC die beste Variante empfohlen, die zwischenzeitlich auch von IPS implementiert wurde.

Wir haben damit begonnen, verschiedene Erweiterungen zu entwickeln und zu evaluieren, die zu einer Effizienzsteigerung unseres Verfahrens führen sollen. Langfristig soll es damit unter anderem möglich sein, gute untere Schranken für längere Zeiträume zu bestimmen und so das Fehlen des „Blickes in die Zukunft“ besser analysieren zu können.

Online-Einsatzplanung von Service-Technikern

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Jörg Rambau

Kooperationspartner: Hermes Technischer Kundendienst (HTK), Intranetz GmbH, DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“

Förderung: Hermes Technischer Kundendienst

Die Einsatzplanung von Service-Technikern eines Kundendienstes verläuft in zwei Schritten:

1. Noch während des Kundenanrufs muss mit dem Kunden ein Termin vereinbart werden, der für gewöhnlich tages- oder halbtagsgenau sein muss.
2. In jeder Nacht muss ein kostenoptimaler Technikereinsatzplan für den Folgetag berechnet werden, so dass jeder Kunde mit Termin an diesem Tag von einem geeigneten Techniker besucht wird. Das Optimierungsergebnis hängt in der Regel wesentlich von den vorher vergebenen Terminen ab.

Das Ziel besteht darin, Termine am Telefon so zu vergeben, dass die für diese Termine optimalen Technikereinsatzpläne möglichst kostengünstig sind.

Das Ziel dieser Studie im Auftrag von Hermes Technischer Kundendienst (HTK) war es, eine Abschätzung des Optimierungspotentials in der Termin- und Tourenplanung für Service-Techniker bei HTK durchzuführen. Ferner sollten Möglichkeiten für eine algorithmische Umsetzung des Potentials aufgezeigt werden.

Testrechnungen unseres Partners Intranetz auf Basis eines vom ZIB entwickelten ge-

nauen mathematischen Modells zeigen ein Optimierungspotential von etwa 10% nur durch nachgelagerte Einsatzplanoptimierung. Die Eigenschaften und die Größe des mathematischen Modells deuten auf die Umsetzbarkeit eines exakten Spaltengenerierungsalgorithmus hin; eine Implementierung eines solchen Algorithmus sprengt jedoch den Rahmen dieses Projektes.

Die Entwicklung mathematischer Methoden für die Online-Terminvergabe ist Gegenstand laufender Forschung (siehe Projekt *Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung*).

Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze

Bearbeitet von: Sven O. Krumke, Diana Poensgen, Jörg Rambau, Andreas Tuchscherer

Kooperationspartner: DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (Berlin), T-Systems Nova GmbH (Berlin)

In zukünftigen optischen Kommunikationsnetzen werden Signale nicht nur in optischer Form über einzelne Glasfasern gesendet, sondern an den Zwischenknoten auch optisch geschaltet. Sie behalten somit die anfangs gewählte Wellenlänge auf ihrem gesamten Weg zwischen Start- und Zielknoten bei. Optische Netze dieser Art werden modelliert als Graph zusammen mit einer Menge von Wellenlängen. Dabei wird für jede Kante des Graphen angegeben, welche Teilmenge aller Wellenlängen darauf zur Verfügung steht. Eine Verbindung in einem optischen Netz wird durch einen *Lichtweg* abgebildet, wobei ein Lichtweg definiert ist als ein Weg in dem Graphen zusammen mit einer Wellenlänge, die auf allen Kanten des Weges verfügbar ist. Die *Wellenlängenkonfliktbedingung* stellt sicher, dass jede Wellenlänge auf einer Kante nur von höchstens einem Lichtweg benutzt wird.

Bei der dynamischen Konfiguration optischer Kommunikationsnetze treffen im Zeitablauf Verbindungsanfragen ein. Eine Verbindungsanfrage gibt dabei einen Start- und einen Zielknoten, die Anzahl der dazwischen benötigten Lichtwege und eine Dauer an. Ein Algorithmus muss für jede neu eintreffende Anfrage sofort entscheiden, ob sie angenommen oder abgelehnt wird. Wird die Anfrage angenommen, so muss der Algorithmus die erforderliche Anzahl an entsprechenden Lichtwegen für die gewünschte Dauer zur Verfügung stellen. Hierbei dürfen bestehende Lichtwege nicht geändert werden, und es muss die Wellenlängenkonfliktbedingung eingehalten werden. Ziel ist es die Gesamtzahl an angenommenen Verbindungsanfragen zu maximieren. Der Online-Charakter des Problems zeigt sich darin, dass keinerlei Informationen über zukünftige Anfragen bekannt sind, wenn die Entscheidung über die aktuelle Verbindungsanfrage getroffen werden muss.

Das Ziel des Projektes ist das Design, die Implementierung und die Bewertung von Algorithmen für die dynamische Konfiguration optischer Netze. Da die vorhandene mathematische Theorie (kompetitive Analyse) zur Bewertung in der Praxis relevanter Algorithmen nicht geeignet ist, wurde deren Qualität hauptsächlich anhand von Simu-

lationen beurteilt. Obwohl die Förderung für dieses Projekt bereits Ende August 2002 ausgelaufen ist, sind im Berichtszeitraum in Folge weiterer Simulationsstudien noch einige Ergebnisse hinzugekommen.

Zum einen hat sich herausgestellt, dass für die bekannten *Greedy*-Algorithmen, die immer kürzeste Lichtweg realisieren, ihre spezielle Ausgestaltung von erheblicher Bedeutung ist (siehe [14]). Abbildung 2.38 zeigt den Verlauf der simulierten Blockierungswahrscheinlichkeiten (Verhältnis von abgelehnten und erzeugten Anfragen) bei wachsender Verkehrslast u. a. für die *Greedy*-Algorithmen. Die besten Ergebnisse liefert die Variante *Greedy-Pack*, die im Fall von Uneindeutigkeit einen kürzesten möglichen Lichtweg in der Wellenlänge wählt, die auf am wenigsten Kanten noch benutzt werden kann. Die entgegengesetzte Strategie *Greedy-Spread* liefert entsprechend die schlechtesten Ergebnisse. Eine zufällige Wahl (*Greedy-Random*) schneidet mittelmäßig ab. Es zeigt sich, dass bei einem realistischen Schwellwert für die Blockierungswahrscheinlichkeit mit der richtigen Wahl der algorithmischen Ausgestaltung das Netz eine bis zu dreifache Verkehrslast bewältigen kann.

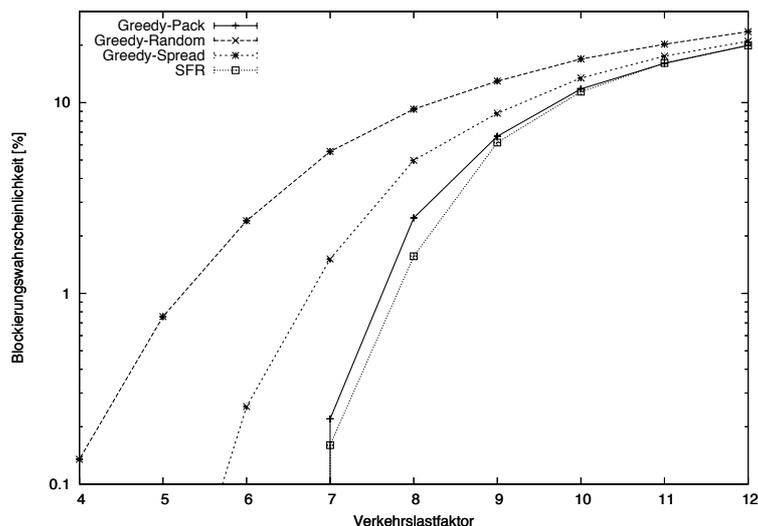


ABBILDUNG 2.38: Ergebnisse ausgewählter Algorithmen.

Außerdem hat sich gezeigt, dass offenbar insbesondere in größeren Netzen mit vielen Wellenlängen die neu entwickelten Algorithmen den *Greedy*-Algorithmen überlegen sind (siehe [20]). So liefert der Algorithmus *SFR*, welcher als Unterprogramm mehrere *Maximalflussprobleme* löst, noch etwas bessere Ergebnisse als der beste *Greedy*-Algorithmus (vgl. Abbildung 2.38). Wir vermuten, dass die volle Stärke der neu entwickelten Algorithmen möglicherweise erst bei realistischeren Szenarien mit weniger homogenen Daten als in den Simulationen richtig zum Tragen kommt. Die *Greedy*-Algorithmen können nämlich ihre Funktionsweise heterogenen Daten nicht anpassen, während die neuen Algorithmen für allgemeine Datenanforderungen konzipiert sind.

Publikationen

- [1] N. Ascheuer, S. O. Krumke und J. Rambau, *Online dial-a-ride problems: Minimizing the completion time*, Proceedings of the 17th International Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1770, Springer, 2000, 639–650.
- [2] L. Becchetti, S. Leonardi, A. Marchetti-Spaccamela, G. Schäfer, und T. Vredeveld, *Average case and smoothed competitive analysis for the multi-level feedback algorithm*, Proceedings of the 44th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS), 2003, 462–471. Auch verfügbar als Report 03–14, ZIB, 2003.
- [3] M. Blom, S. O. Krumke, W. E. de Paepe und L. Stougie, *The online-TSP against fair adversaries*, *Inform Journal on Computing* **13** (2001), Nr. 2, 138–148.
- [4] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.
- [5] A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *A heuristic for the stacker crane problem on trees which is almost surely exact*, Proceedings of the 14th International Symposium on Algorithms and Computation, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2003, erscheint.
- [6] A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *Scheduling a server on a caterpillar network - a probabilistic analysis*, Proceedings of the 6th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems, 2003, 48–50, erhältlich als Report 03–12, ZIB, 2003.
- [7] A. Fiat und G. J. Woeginger (Hrsg.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [8] P. Friese, *Echtzeitsteuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2003.
- [9] M. Grötschel, D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *Simulation Studies for the Online Dial-a-Ride-Problem*, Preprint SC 99-09, ZIB, 1999, Extended Abstract präsentiert auf Odysseus 2000, Kreta, 2000.
- [10] M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Online optimization of complex transportation systems*, Online Optimization of Large Scale Systems (M. Grötschel, S. O. Krumke, und J. Rambau, Hrsg.), Springer, 2001, 705–730.
- [11] M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Online-dispatching of automobile service units*, Operations Research Proceedings (U. Leopold-Wildburger, F. Rendl und G. Wäscher, Hrsg.), Springer, 2002, 168–173.

- [12] D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *The online dial-a-ride problem under reasonable load*, Proceedings of the 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1767, Springer, 2000, 137–149, lange Version erscheint in: Theoretical Computer Science.
- [13] D. Hauptmeier, S. O. Krumke, J. Rambau und H.-C. Wirth, *Euler is standing in line*, Discrete Applied Mathematics **113** (2001), 87–107.
- [14] R. Hülsermann, M. Jäger, S. O. Krumke, D. Poensgen, J. Rambau und A. Tuchscherer, *Dynamic routing algorithms in transparent optical networks*, Proceedings of the 7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling, Bd. 1, 293–312, Kluwer Academic Press, 2003.
- [15] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *News from the online traveling repairman*, Theoretical Computer Science **295** (2003), Nr. 1–3, 279–294.
- [16] S. O. Krumke, L. Laura, M. Lipmann, A. Marchetti-Spaccamela, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *Non-abusiveness helps: An $O(1)$ -competitive algorithm for minimizing the maximum flow time in the online traveling salesman problem*, Proceedings of the 5th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2462, Springer, 2002, 200–214.
- [17] S. O. Krumke, N. Megow, und T. Vredeveld, *How to whack moles*, Proceedings of the 1st Workshop on Approximation and Online Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2909, Springer, Berlin, 2004, 192–205.
- [18] S. O. Krumke, J. Rambau, und L. M. Torres, *Realtime-dispatching of guided and unguided automobile service units with soft time windows*, Algorithms – ESA 2002, 10th Annual European Symposium on Algorithms, Proceedings (R. H. Möhring und R. Raman, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2461, Springer, 2002.
- [19] D. D. Sleator und R. E. Tarjan, *Amortized efficiency of list update and paging rules*, Communications of the ACM **28** (1985), Nr. 2, 202–208.
- [20] A. Tuchscherer, *Dynamical configuration of transparent optical telecommunication networks*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin und ZIB, 2003.

2.2.11 Verkehr

Die Anwendung mathematischer Optimierung im Bereich des öffentlichen Verkehrs wird seit vielen Jahren erfolgreich erforscht, und in letzter Zeit werden solche Methoden auch verstärkt in der Praxis eingesetzt. Am ZIB laufen bereits seit über zehn Jahren Projekte in diesem Bereich. Vorwiegend wurden dabei Projekte in der operativen Planung durchgeführt, z. B. für die Fahrzeugumlauf- und Dienstplanung im öffentlichen

Nahverkehr. Während der letzten Jahre, insbesondere im Berichtszeitraum, haben sich nun die Anwendungsbereiche erweitert.

Auf der einen Seite stehen nun die Integration der Teilprobleme der operativen Planung im Vordergrund, so zum Beispiel im Projekt *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV*. Hierbei werden die in der Vergangenheit erforschten Methoden für die Umlaufplanung und Dienstplanung kombiniert und weiterentwickelt.

Auf der anderen Seite haben wir den Einsatz mathematischer Optimierung auf die *strategische Planung* und die *Trassenbörse* erweitert. Bei der strategischen Planung geht es um die effiziente Planung von Nahverkehrsnetzen, so zum Beispiel die Berechnung von günstigen Linien in der Linienplanung. Bei der Trassenbörse wird die Planung des Schienenverkehrs für konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen untersucht.

Schließlich untersucht das Projekt *Management verteilter Lager* ein Transportproblem im Verkehr mit unsicherer (stochastischer) Nachfrage.

Integrierte Umlauf- und Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel, Steffen Weider

Kooperationspartner: IVU Traffic Technologies AG (Berlin), Mentz Datenverarbeitung GmbH (München), Regensburger Verkehrsbetriebe GmbH (Regensburg)

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Wichtige Teilschritte der operativen Planung von Verkehrsbetrieben sind die Fahr- oder Umlaufplanung und die Dienstplanung [6]. Die meisten Verkehrsbetriebe planen diese Teilschritte sequentiell. Sind jedoch nur wenig Ablösemöglichkeiten oder Pausenorte für die Fahrer vorhanden, kann diese Vorgehensweise zu Problemen führen, da Dienste aufgrund gesetzlicher Vorschriften nach einer gewissen Lenk- oder Arbeitszeit durch Pausen unterbrochen oder beendet werden müssen. Um dies zu ermöglichen, wird in vielen Verkehrsbetrieben bereits in der Umlaufplanung genügend Standzeit eingeplant, damit die Fahrer ihre Pausen im Fahrzeug wahrnehmen können. Zusätzlich werden die Umläufe so gebildet, dass sie regelmäßig an einer Ablösestelle oder einem Pausenort vorbeiführen. Durch diese Vorgehensweise ist in der Regel in den Umläufen mehr Standzeit enthalten, als tatsächlich für die Pausenregeln der Dienstplanung benötigt wird. Diese Optimierungspotentiale kann man nur mit einer integrierten Herangehensweise ausschöpfen.

Unser Verfahren zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung beruht auf einer Modellierung des Problems als eine Kopplung der ganzzahligen linearen Programme für die beiden Einzelprobleme, ähnlich wie in [4] beschrieben. Ziel der Optimierung ist es, einen Mix von Fahrzeug- und Dienstkosten, die von der Anzahl und Art der Fahrzeuge und Dienste, von den angewendeten Pausenregeln, der Arbeitszeit und vielen anderen Faktoren abhängen können, zu minimieren.

Um das Problem zu lösen, relaxieren wir die Kopplungsbedingungen der Umlauf- und der Dienstplanung und berechnen eine approximative untere Schranke für die Kosten

der optimalen Umlauf- und Dienstpläne. Dazu verwenden wir Methoden, die auf den am ZIB entwickelten Verfahren zur Umlauf- und Dienstop Optimierung basieren [7, 2]. Durch Anwendung des Bündelverfahrens [5] erhalten wir zusätzlich eine Näherung einer primalen Lösung der LP-Relaxierung des gekoppelten Modells. Diese Informationen nutzen wir in einer Art Branch-And-Bound-Verfahren, um gültige Dienst- und Umlaufpläne zu erzeugen.

Im Berichtszeitraum haben wir neben regionalen Szenarien auch zwei Instanzen eines städtischen Verkehrsbetriebes untersucht. Uns standen dazu die Daten des Werktag- und des Wochenendfahrplans der Regensburger Verkehrsbetriebe (RVB) zur Verfügung.

Das Liniennetz des RVB ist im wesentlichen sternförmig. Ablösestellen für die Fahrer stehen nur an vier verschiedenen Orten an den Schnittstellen der Linien zur Verfügung. Diese Orte liegen alle in der Nähe des Hauptbahnhofes, der nicht weit vom Betriebshof entfernt ist. Durch diese Struktur ist die reine sequentielle Optimierung von Umlauf- und Dienstplan nicht sinnvoll und führte in unseren Tests zu schlechteren Ergebnissen als die Referenzlösung.

An Werktagen werden von der RVB mit einem Betriebshof und drei verschiedenen Fahrzeugtypen 1.414 Fahrten durchgeführt, auf denen teilweise Ablösestellen liegen, so dass 3.666 Dienstelemente mit Diensten überdeckt werden müssen. Es gibt 57.646 potentielle Leerfahrten und insgesamt 233.842 mögliche Verknüpfungen zwischen den Knoten des Planungsgraphen. Bei der Dienstbildung werden sowohl Sechstel-Regel als auch Blockpausen berücksichtigt. Zusätzlich mussten Vorgaben bzgl. der durchschnittlichen Dauer der Dienste eingehalten werden. Nach unseren Information ist dies das bisher größte und komplexeste erfolgreich gelöste integrierte Umlauf- und Dienstplanungsproblem.

Die Anwendung unseres Verfahrens konnte im Vergleich zur Referenzlösung die Anzahl der Dienste um ca. 2–3%, die Gesamtarbeitszeit um ca. 5% und die Zeit, die die Fahrzeuge außerhalb des Betriebshofes verbringen, um ca. 4% senken.

Details zu älteren Rechenergebnissen können in [3] gefunden werden, die neuen Ergebnisse werden wir auf der CASPT 2004 in San Diego präsentieren.

Management verteilter Lager: Transportorganisation bei stochastischer Nachfrage

Bearbeitet von: Stefan Röhl

Kooperationspartner: Christoph Helmberg (Technische Universität Chemnitz); eCom Logistik; Herlitz PBS AG

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Unternehmen, die Lagerhäuser an mehreren Standorten betreiben, nutzen meist einen LKW-Shuttledienst zur Umschichtung der Produktmengen zwischen den Lagern entsprechend dem Bedarf und den jeweiligen Lagerkapazitäten. Dabei sind die Bedarfe

z. T. nur sehr kurz im Voraus bekannt, so dass die Zeit nicht in jedem Fall ausreicht, um Ware aus anderen Lagerhäusern rechtzeitig heranzuschaffen. Bei Nachfragespitzen kann es darüber hinaus zu Engpässen bei den vorhandenen Transportkapazitäten kommen. Gesucht wird nun eine Umschichtung der Güter zwischen den Lagern, so dass alle Anfragen mit möglichst hoher Wahrscheinlichkeit zeitgerecht befriedigt werden können und die dabei anfallenden Fahrtkosten minimiert werden. Dabei ist zu berücksichtigen, dass viele Artikel nur palettenweise in großen Stückzahlen transportiert werden.

Konkret untersuchen wir in diesem Projekt, das seit April 2001 vom BMBF innerhalb des Förderprogramms *Neue mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung* unterstützt wird, das folgende Fallbeispiel. Unser Projektpartner, die eCom Logistik, betreibt Lagerhäuser an zwei verschiedenen Standorten in Berlin und Umgebung und bietet als Dienstleistungen die Lagerung, die Kommissionierung und den Versand von Waren an. Der derzeit größte Kunde der eCom Logistik ist die Herlitz PBS AG, für die ca. 40.000 Artikel größtenteils in produktreinen Paletten vorrätig gehalten werden. Zunehmende Bedeutung erlangt für die eCom Logistik daneben das Neukundengeschäft, das ein wachsendes Volumen einnimmt und das im Berichtszeitraum fortlaufend in das Projekt integriert wurde.

Aufgabe der eCom Logistik ist es, die Auslagerungsanfragen an jedem Ort zeitgerecht zu bedienen. Die Planung der Transporte erfolgt zur Zeit von Hand, wobei die Verteilung der Artikel auf die Lager im wesentlichen freigestellt ist und auf eigene und angemietete Lastkraftwagen zurückgegriffen wird.

Als mathematisches Modell dienen uns dabei durch lineare Nebenbedingungen gekoppelte Netzwerkflussprobleme, die den zeitdiskretisierten Fluss der LKWs und Paletten der verschiedenen Artikel widerspiegeln. Es soll durch eine geeignete Wahl einer quadratischen Zielfunktion, die die Transportkosten und vorgegebene prognostizierte Sicherheitsniveaus für die einzelnen Artikel berücksichtigt, eine ausreichende Bevorratung der Artikel erzwungen werden. Als Alternative ist auch die direkte Nutzung einer stochastischen Auswahlfunktion für die Wahl der Artikel bei der Transportplanung möglich. Für die Schätzung der Sicherheitsniveaus werden geeignet gewichtete empirische Verteilungen der Nachfrage der einzelnen Artikel an den Standorten für die letzten Wochen genutzt, da sich hierfür kein parametrisches Modell als geeignet erwies.

Um trotz der Größe des entstehenden quadratischen Programms rasch zu guten Näherungslösungen zu kommen, wurde ein Dekompositionsansatz mittels Lagrange-Relaxierung in Kombination mit einem Bündelverfahren zur Bestimmung der Multiplikatoren gewählt. Das verwendete Bündelverfahren ist eine auf den Erfahrungen im Projekt *Semidefinite Optimierung* aufbauende Eigenentwicklung, die die Aggregation der Subgradienten gleichzeitig zur Erzeugung von primalen Näherungslösungen nutzt und den Einsatz primaler Schnittebenen gestattet.

Ein Schwerpunkt der Arbeit im Berichtszeitraum war die Weiterentwicklung des Datenportals gemäß den Anforderungen der Datenspezifikation. Dabei waren diverse Än-

derungen und Ergänzungen notwendig, die u.a. durch das Neukundengeschäft erforderlich wurden. Die eCom Logistik konnte uns leider die vereinbarten Online-Daten nur mit großer zeitlicher Verzögerung bereitstellen. Nachdem zum Anfang des Jahres sukzessiv alle Lieferdaten eingespielt waren, erhielten wir ab März die Daten aus der Kommissionierung. Große Probleme gab es bei der Übermittlung der Bestandsdaten, da diese auf Grund der Unterschiede zwischen dem Lagermodell des Lagerverwaltungssystems der eCom Logistik und unserem Modell nur bei absolutem Lagerstillstand vor Ort möglich ist. Die Bestandsdaten konnten so erst Ende November 2003 erfolgreich eingespielt werden.

Damit standen erst ab diesem Zeitpunkt Daten zum Testen des in der Zwischenzeit entwickelten quadratischen Ansatzes zur Verfügung. Der in der ersten Projektphase verfolgte Ansatz mit linearer Zielfunktion und starrer Bevorratung hatte sich im Test mit den verfügbaren Offline-Daten in Bezug auf die Performance zwar bewährt, die Auswahl der Artikel bereitete jedoch bei sehr großem Transportbedarf z.T. Probleme, da zwischen den Buchungsbedarfen und der Bevorratung keine wirkliche Unterscheidung gegeben war. Die Ergebnisse der ersten Tests für das quadratische Modell sind recht vielversprechend, müssen aber noch fortgesetzt werden, da die Anforderungen in Bezug auf die Performance noch Verfeinerungen am Bündelverfahren erforderlich machen. Da hier jedoch als Alternative auch die Nutzung der stochastischen Auswahlfunktion in einem reinen palettenbasierten Netzwerkflussproblem möglich ist, kann davon ausgegangen werden, dass die geforderte Performance für die Anwendung in der Transportplanung der eCom Logistik erreicht werden kann.

Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Havelbus Verkehrsgesellschaft mbH; IVU Traffic Technologies AG; Lufthansa Systems AG; ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH

Förderung: DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“

Ziel dieses Projekts ist die Untersuchung der Einsatzmöglichkeiten kombinatorischer bzw. nichtlinearer Optimierung im Bereich der strategischen Planung im öffentlichen Nahverkehr. Während der Einsatz solcher Methoden in der operativen Planung, z.B. in der Umlauf- und Dienstplanung, vielfältig untersucht wurde, ist dies im strategischen Bereich weniger der Fall.

Ein zentrales Problem der strategischen Planung ist die *Linienplanung*, auf die wir uns im Berichtszeitraum hauptsächlich konzentriert haben. Gegeben ist hierbei ein Nahverkehrsnetz, d.h. benutzbare Strecken, Straßen, etc. Weiterhin werden Informationen über das voraussichtliche Passagieraufkommen benötigt. Die Aufgabe ist nun in dem gegebenen Netz Linien so zu planen, dass alle Passagiere transportiert werden. Zu einer Linie gehören hierbei ihre Route im Netz und eine Frequenz, welche die durchschnittliche Anzahl der Fahrten während des Zeithorizonts angibt. Dabei sollen auf der einen Seite die Kosten für den Betrieb der Linien minimiert werden und auf der



ABBILDUNG 2.39: *Links*: Bestehendes Liniennetz in Potsdam. *Rechts*: Berechnete Verbesserungen. Die Liniendicken sind jeweils proportional zur Frequenz der entsprechenden Linien.

anderen Seite die Fahrzeiten für die Passagiere so klein wie möglich bleiben.

Wir haben zwei kombinatorische Optimierungsmodelle für die Linienplanung entwickelt, welche von den bisher bekannten Modellen in zwei Punkten abweichen. Erstens werden Passagiere nicht im Vorhinein auf die Benutzung bestimmter Wegstrecken (z.B. kürzeste Wege) festgelegt. Zweitens werden die Linien in unserem Ansatz dynamisch generiert. Für eines dieser Modelle haben wir ein Programm implementiert, welches dessen LP-Relaxierung mit einem Column-Generation-Verfahren löst. Dieses Modell lässt sich als Mehrgüterflussproblem in Pfad-Variablen für die Wege der Passagiere und die Wege der Linien sehen. Dabei soll die Anzahl der Passagiere, welche eine bestimmte Strecke passieren kleiner sein als die Kapazität der Linien, welche diese Strecke benutzen.

Ein erster Test der Implementierung wurde auf Daten aus Potsdam gestartet, welche von unseren Kooperationspartnern zur Verfügung gestellt wurden; siehe Abbildung 2.39. Die erzielten Ergebnisse müssen nun mit den Projektpartnern besprochen und die Implementierung entsprechend angepasst werden. Wir hoffen, im Jahr 2004 Fortschritte bei der Lösung praxisrelevanter Szenarien zu erzielen.

Trassenbörse im Bahnverkehr

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Sascha G. Lukac

Kooperationspartner: Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), TU Berlin; Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (WIP), TU Berlin; Ilgmann + Miethner Unternehmensberatung, Berlin

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im Projekt Trassenbörse wird ein Modell zur effizienten und diskriminierungsfreien Vergabe von Schienennetzkapazitäten an Eisenbahnverkehrsunternehmen entwickelt.

Welche Güter kann man in der Trassenbörse erwerben? Mit unseren Kooperationspartnern haben wir uns darauf verständigt, dass eine einzelne *Trasse*, also ein zeitlich und räumlich spezifizierter Zuglauf, das Gut ist. Ein Trassenwunsch kann von einem Kaufinteressenten (*Bieter*) mit räumlichen und zeitlichen Freiheitsgraden versehen werden. Kombinationswünsche zwischen mehreren Trassen sind in begrenztem Umfang möglich.

Das zentrale Medium der Trassenvergabe ist eine Auktion mit mehreren Runden, deren Funktionsweise vom Kooperationspartner WIP entworfen wird. In jeder Runde wird dabei von uns der einnahmenmaximierende Fahrplan gemäß den aktuell offenbarten Zahlungsbereitschaften berechnet.

Welchen Beitrag liefert das ZIB für das Projekt? Unser erster Beitrag war ein einfaches, kombinatorisches Modell des Bahnbetriebs. Viele komplexe Bedingungen, z. B. bei der Sicherungstechnik, haben wir darin effizient zusammengefasst.

Wir haben ein ganzzahliges lineares Programm entwickelt, das in [1] beschrieben ist. Wir nennen es OPTRA in Anlehnung an die Optimalen TRassenvergabe. Die Zielfunktion ist die Maximierung der Summe der Zahlungsbereitschaften für die realisierten Trassen. Zur Zeit benutzen wir zur Lösung des ganzzahligen Programms die Standardsoftware CPLEX.

Aktuell optimieren wir Szenarien mit bis zu 1000 Trassenanfragen auf dem Bahnnetz Hannover – Braunschweig – Fulda über einen Fahrplanhorizont von sechs Stunden. Das Testnetz enthält 31 Bahnhöfe und hat eine Gesamtleislänge von über 2000 km.

Wie sieht die Modellierung im Detail aus? Der Abschnitt zwischen zwei Bahnhöfen wird als Kante in einem Graphen angesehen. Nur eine Hand voll von zugbaureihenabhängigen Fahrweisen werden betrachtet, die wir Zugtypen nennen. Für diese Zugtypen wird die gesamte bahnbetriebliche Information für einen Abschnitt durch zwei Kenngrößen beschrieben. Die Zugfolgezeit $Z(e, y_1, y_2)$ gibt an, wie lange am Anfang der Kante e ein Zug vom Typ y_2 warten muss, wenn vorher ein Zug vom Typ y_1 in die Kante eingefahren ist. Die gesamte Sicherungstechnik wird durch diese Zahl abgedeckt. Zusammen mit der Fahrzeit $F(e, y)$ für einen Zug vom Typ y für die Fahrt durch den Abschnitt e erhalten wir diese Daten vom Kooperationspartner SFWBB.

Werden auch komplizierte bahnbetriebliche Vorgänge modelliert? Für die Behandlung der eingleisigen Strecken oder der höhengleichen Kreuzung des Gegengleises haben wir eine ähnliche Modellierung gewählt. In unserem Testnetz haben wir erfolgreich die sogenannte Hildesheimer Kurve modelliert, die beide bahnbetrieblichen Besonderheiten miteinander vereint.

Was sagen die Bahnpraktiker zu dieser Modellierung? Durch unsere Modellierung entsteht ein *Grobfahrplan*, wie in Abbildung 2.40 dargestellt, der anschließend in einen Feinfahrplan umgesetzt wird. Die Untersuchung dieser Umsetzung mittels bahnbetrieblicher Standardsoftware ist Aufgabe des Projektpartners SFWBB. Auf dem BMBF-Workshop zum Bahnverkehr am 12.02.2004 an der TU Berlin wurde unser Ansatz überwiegend als geeignet für die weitere Forschung beurteilt.

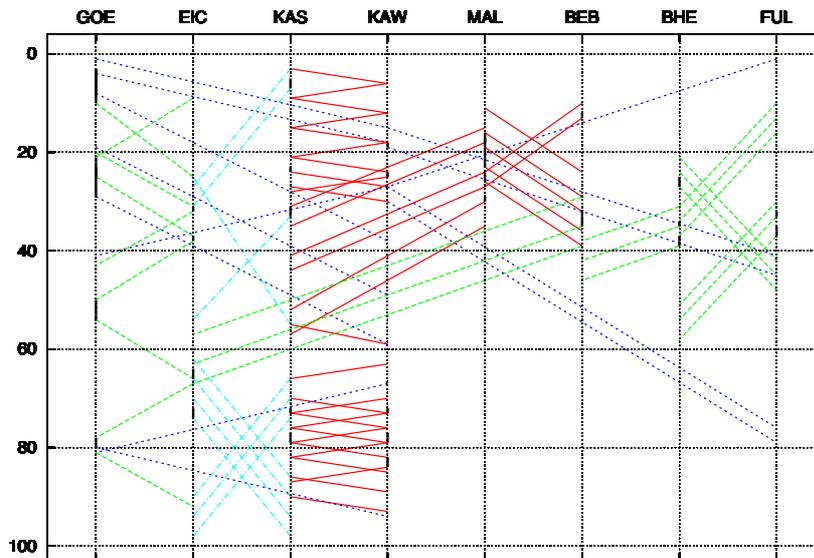


ABBILDUNG 2.40: Ein Grobfahrplan für 53 Trassen über einen Zeithorizont von 100 Minuten.

Für welche Zeiträume werden die Rechte für Trassen vergeben? Es wird verschiedene Zeiträume geben: Ein Güterzug für eine einfache Fahrt an einem Tag oder ein Fernverkehrs zug, der über mehrere Jahre eingeplant wird. Dies wirft einige Probleme auf, da wir voraussichtlich nur für die Größenordnung eines Betriebstages einen optimalen gesamtdeutschen Fahrplan finden können. Hier muss die vom Kooperationspartner WIP zu entwerfende Marktordnung weiterhelfen, die das Zusammenwirken von unterschiedlichen Auktionen in gewissen Rhythmen zusammen mit der freien, kurzfristigen Vergabe regelt.

Was sind die nächsten Ziele? Wir werden einen Spezialalgorithmus OPTRA-Tool zur Lösung des OPTRA-Modells entwickeln, da CPLEX bei den von uns untersuchten Test-Szenarien bereits an die Grenzen seiner Leistungsfähigkeit stößt. Ausgehend von ersten Ergebnissen bei der Analyse von Cliques und der Perfektheit von gewissen Teilgraphen des kombinatorischen Modells wollen wir die zukünftigen mathematischen Fortschritte in der graphentheoretischen und polyedrischen Untersuchung des OPTRA-Modells algorithmisch umsetzen.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und S.G. Lukac, *Das OPTRA-Modell zur optimalen Trassenvergabe*, Projektbericht, 2004.
- [2] R. Borndörfer und A. Löbel, *Scheduling duties by adaptive column generation*, Report 01–02, ZIB, 2001.

- [3] R. Borndörfer, A. Löbel und S. Weider, *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Nahverkehr*, Heureka '02: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (2002), 77–98.
- [4] R. Freling, D. Huisman und A.P.M. Wagelmans, *Models and Algorithms for Integration of Vehicle and Crew Scheduling*, J. of Scheduling **6** (2003), 63–85.
- [5] K.C. Kiwiel, *Proximity Control in Bundle Methods for Convex Nondifferentiable Optimization*, Mathematical Programming **46** (1990), 105–122.
- [6] M. Kolonko und W. Fengler, *Entwicklung von Fahrplänen unter mehrfacher Zielsetzung*, Der Nahverkehr **11** (1997), 45–48.
- [7] A. Löbel, *Solving Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Proceeding of the 7th International Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport (1999), 195–222.

2.2.12 Grid Computing

In diesem Schwerpunkt arbeiten wir an der Entwicklung von Methoden zur effizienten Nutzung geographisch verteilter Ressourcen [1, 3] wie z.B. Rechenkapazität, Speicherplatz, Datenübertragungsleistung und so weiter. Die Heterogenität der beteiligten Komponenten macht ihre Integration besonders schwierig, weshalb wir im GridLab-Projekt eine autonome Dienstsicht eingeführt haben, mit der Anwendungen in beliebigen Grid-Umgebungen ablaufen können. In dem EU-Projekt FlowGrid entwickeln wir Grid-Software für Strömungssimulationscodes, die kommerziell eingesetzt werden.

Neben diesen konkreten Projekten fokussiert sich unsere Forschungsarbeit zunehmend auf den Aspekt des Datenmanagements in verteilten Systemen. Unterstellt man eine gewisse Unzuverlässigkeit (oder Nicht-Verfügbarkeit) der Knoten, so müssen Replikate der Daten angelegt werden. In einem ersten Teilprojekt haben wir untersucht, wieviele Replikate unter welchen Bedingungen notwendig sind [4] und in einem zweiten, wie diese untereinander synchronisiert werden können [6]. Das Platzierungsproblem, d.h. an welchen Orten die Repliken am besten angelegt werden sollen, ist Inhalt unserer derzeitigen Forschungsarbeit.

GridLab - A Grid Application Toolkit and Testbed for a Grid Laboratory

Bearbeitet von: Thorsten Schütt, Minor Gordon, Felix Hupfeld, Andrei Hutanu, Thilo Koch, André Merzky, Alexander Reinefeld, Simon Rieche, Florian Schintke, Brygg Ullmer, Stefan Zwierlein

Kooperationspartner: PSNC (Polen), AEI (Potsdam), ZIB (Berlin), Masaryk University (Tschechien), MTA SZTAKI (Ungarn), VU (Niederlande), ISUFI/HPCC (Italien), Cardiff University (United Kingdom), NTUA (Griechenland), University of Chicago

(USA), ISI (USA), University of Wisconsin (USA), SUN (USA), Hewlett-Packard (Frankreich)

Förderung: Europäische Union

Um Anwendungsprogrammierern den Einstieg in das Grid Computing zu erleichtern, werden Werkzeuge benötigt, die ihnen bei der effizienten Einbettung ihrer komplexen Anwendungen in Grid-Umgebungen helfen. Im europäischen Projekt GridLab (www.gridlab.org) entwickeln wir eine „Middleware“, die als Zwischenschicht zwischen dem Anwendercode und der darunter liegenden Grid-Umgebung vermittelt (siehe Abbildung 2.41). Diese Middleware soll stellvertretend für die Anwendung entscheiden, auf welche Dienste in den jeweiligen Grid-Umgebungen zugegriffen wird. Die Entscheidung soll vollständig autonom in der Middleware gefällt werden, damit die Anwendung ohne Modifikation – ja, sogar ohne genaue Kenntnis der Laufzeitumgebung – auf nahezu beliebigen Grid-Umgebungen ablaufen kann.

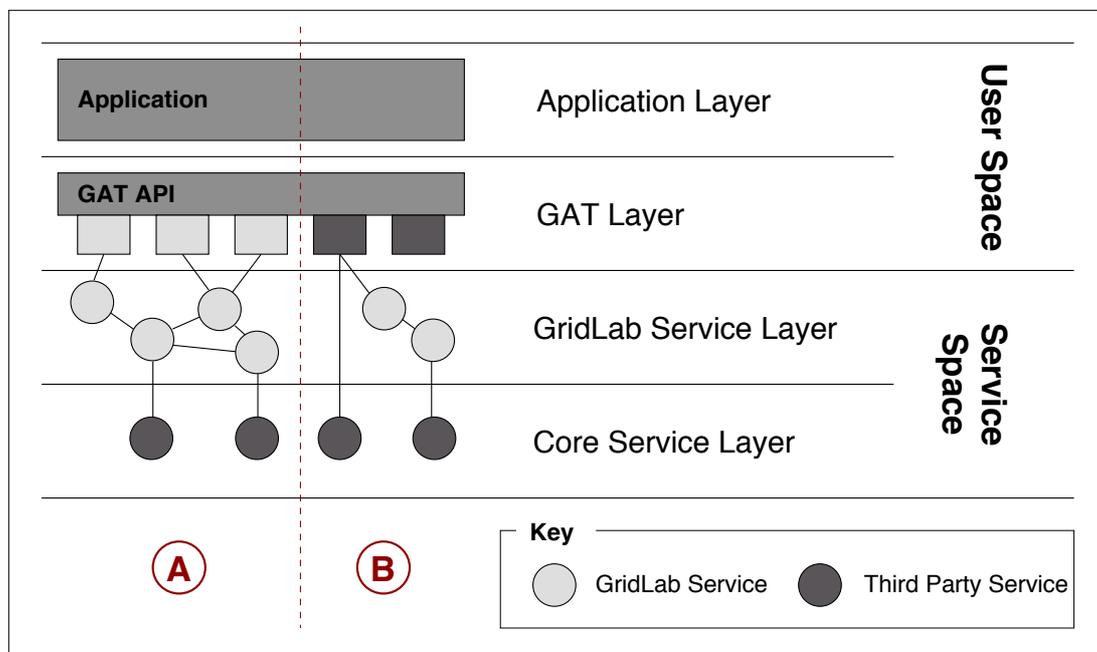


ABBILDUNG 2.41: GridLab Systemarchitektur

Das Funktionieren und die Effizienz der GridLab-Middleware soll beispielhaft anhand zweier Anwendungen demonstriert werden: CACTUS, ein Code zur Simulation kollidierender Neutronensterne, und TRIANA, ein Analysewerkzeug zur Auswertung der im GEO 600-Experiment gesammelten Daten, die der empirischen Verifikation der Einsteinschen Raumzeitkrümmung dienen sollen. Die in Hannover gewonnenen GEO 600-Daten werden täglich über eine Weitverkehrsverbindung ans ZIB geliefert und im Archiv für die spätere Offline-Auswertung gespeichert. Beide Anwendungen die-

nen auch der Erprobung komplexer Szenarien, wie z.B. der Migration einer laufenden GridLab-Anwendung von einem Rechner auf den nächsten.

Im GridLab-Projekt leiten wir das Arbeitspaket „Data Handling and Visualization“. Im Berichtsjahr haben wir einen webbasierten Visualisierungsserver, eine attributbasierte Dateiverwaltungskomponente und ein Tool zum effizienten Zugriff auf entfernte Daten entwickelt und implementiert. Der Visualisierungsserver erlaubt es Forschern, die Ergebnisse von entfernt laufenden Jobs komfortabel graphisch darzustellen. Typischerweise werden dafür nur Teilmengen der entfernten Daten verwendet. Unser Tool kann sehr effizient fast beliebige Teilmengen aus entfernten Dateien extrahieren. Die Dateiverwaltungskomponente setzt auf dem Replikatkatalog auf, den wir ebenfalls im Rahmen dieses Projekts entwickelt haben. Zusammen bilden diese eine Abstraktionsschicht, die vom Speicherort der Dateien abstrahiert und eine ausdrucksstarke Benennung der Dateien erlaubt.

FlowGrid - Flow Simulations On-Demand Using Grid Computing

Bearbeitet von: Jan Wendler, Artur Andrzejak, Guillermo Arias del Rio, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Kooperationspartner: University of Zaragoza (Spanien), CERTH/HIT (Griechenland), SKODA (Tschechien), HSVA (Hamburg), SYMBAN (United Kingdom)

Förderung: Europäische Union

Im europäischen FlowGrid-Projekt (www.unizar.es/flowgrid) entsteht eine virtuelle Organisation für die Durchführung von Strömungssimulationsrechnungen, um damit eine gemeinsame Nutzung von Software, Computerressourcen und Wissen zu ermöglichen. Dazu wird mit Hilfe von Grid-Infrastruktur ein Netzwerk von Anbietern von Rechenkapazität, Programmeigentümern und Nutzern eingerichtet. Die Vorbereitung, Ausführung und Überwachung der Simulationen sind sowohl räumlich als auch organisatorisch verteilt. Das FlowGrid-System wird für die Durchführung anspruchsvoller Simulationen in den Bereichen Schiffbau, Autoabgase und Verbrennung fossiler Brennstoffe durch die Projektpartner eingesetzt.

Innerhalb des Projektes ist unsere Forschungsgruppe für die Entwicklung und Bereitstellung der Middleware, das sog. „FlowServe“, verantwortlich. Im Berichtszeitraum wurde ein voll funktionierender FlowServe-Prototyp entwickelt. FlowServe besitzt Schnittstellen zum Benutzerprogramm GenIUS, zu den Ressourcen-Managern und zur zentralen Datenbank DBMS. Das GenIUS-Benutzerinterface (oder ein anderes Benutzerprogramm) übergibt FlowServe den Auftrag zur Durchführung einer Simulation. FlowServe verteilt die Simulation auf geeignete Cluster, überwacht dessen Ausführung und generiert Status- und Fortschrittsberichte. Abbildung 2.42 zeigt die FlowGrid-Software mit ihren Komponenten.

Unser Hauptanliegen in diesem Projekt ist die Erforschung und Entwicklung von Grid-Umgebungen, die einen benutzerfreundlichen und effizienten Zugriff auf geographisch verteilte Ressourcen ermöglichen. Als Spezialfall ist in FlowServe auch die gleichzei-

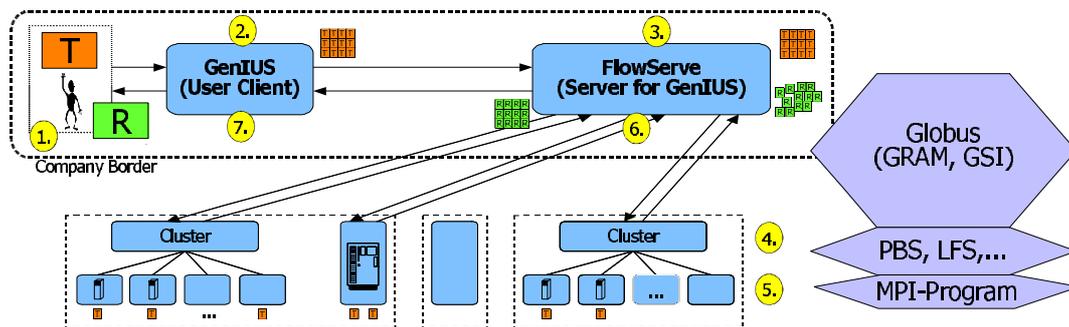


ABBILDUNG 2.42: Verteilte Job-Ausführung in FlowGrid

tige Ausführung gekoppelter Anwendungen auf verschiedenen Systemen möglich. Mit den Ergebnissen dieses Projektes werden Anwender (nicht nur der Strömungssimulation) in die Lage versetzt, die modernen Techniken und Werkzeuge des Grid Computing ohne spezielle Kenntnisse anzuwenden.

Modellierung der Verfügbarkeit von Datei-Replikaten in großen Grid-Systemen

Bearbeitet von: Florian Schintke, Alexander Reinefeld

Grid-Umgebungen werden derzeit hauptsächlich zur Verteilung von Rechenaufträgen auf geographisch verteilte Rechner genutzt, während Peer-to-Peer-Umgebungen, wie Tauschbörsen, eher beim Lagern und Austauschen von Daten eingesetzt werden. Erstere werden eher im wissenschaftlichen, letztere im privaten Umfeld genutzt. Gründe für die bisher geringe Akzeptanz von Peer-to-Peer Speicherlösungen im wissenschaftlichen Kontext könnten die ungewisse Dateiverfügbarkeit und die Datensicherheit bzw. Persistenz sein.

Um ein dem Peer-to-Peer-Ansatz folgendes System zu bauen, das vorgegebene Dateiverfügbarkeiten automatisch gewährleistet [5], wurden Modelle entwickelt, die die Dateiverfügbarkeit in solchen Systemen beschreiben. Kernpunkt ist dabei der zweistufig ablaufende Prozess des Dateizugriffs. Zunächst werden die Replika-Kataloge befragt, auf welchen Rechnern Kopien einer Datei abgelegt sind. Danach wird versucht, auf diese Kopien zuzugreifen. Die entwickelten Modelle berücksichtigen mehrere Architekturparameter, wie z.B. die Knotenzuverlässigkeit, die Katalogzuverlässigkeit, das Konsistenzmodell zwischen Katalogen und die Anzahl der Kataloge und Replikate im System.

Im Gegensatz zu anderen Modellen unterscheiden wir zwischen einer lokalen und einer globalen Sichtweise auf das System. Während die lokale Sicht in ein sich selbst überwachendes System eingebaut werden kann, um eine vorgegebene Mindestverfügbarkeit zu gewährleisten, dient die globale Sicht dem Systemadministrator, den Bedarf

an Replikaten und somit an benötigter Speicherkapazität im Gesamtsystem abzuschätzen.

Das Modell und seine Einsatzmöglichkeiten sind detailliert in [4] beschrieben.

StorageBox - Attributbasiertes Management von Informationen

Bearbeitet von: Felix Hupfeld, Minor Gordon, Thilo Koch

Persönliche Informationen wie Fotos, Mails, Briefe und Termine sind heute auf viele verschiedene Arten im Computer gespeichert und jeweils nur über spezielle Benutzerschnittstellen zugreifbar und verwaltbar. Das Dateisystem hält zwar die meisten der Daten, ist mit seiner hierarchischen Benennung aber sehr unflexibel, weil Daten meist nicht eindeutig in ein Verzeichnis passen, sondern unter mehreren Kategorien abgelegt werden müssen. Auch werden Daten wie z.B. Emails und Termine nur in speziellen Datenbasen gespeichert und sind deshalb nur über die jeweilige Anwendung erreichbar. Diese inhomogene Ablage macht es unmöglich, persönliche Informationen untereinander zu verknüpfen und auf sie über eine konsistente Benutzerschnittstelle zuzugreifen.

Mit StorageBox [2] wird ein System zur verteilten Speicherung von Information entwickelt, das alle Daten des Benutzers auf dessen persönlichen Geräten speichert und verwaltet. Die Daten können dabei flexibel mit Hilfe von Attribut-Wert Paaren in Kategorien einsortiert werden. Der Zugriff auf das System erfolgt über einen Desktop; ein eigens dafür entwickelter Data-Mining-Algorithmus erlaubt einen hierarchischen Zugriff auf die Daten, der sehr der Interaktion mit dem vertrauten Dateisystem ähnelt. Durch Mehrbenutzerfähigkeit und die Verwendung standardkonformer Schnittstellen ist StorageBox auch zur Datenorganisation im Grid einsetzbar.

Der Kern von StorageBox ist ein Datenbanksystem, das der mobilen Natur heutiger Geräte Rechnung trägt, und es deshalb erlaubt, die verwalteten Daten auch ohne verfügbares Netzwerk zu ändern und später die Änderungen mit beliebigen Partnern zu synchronisieren. Wegen der begrenzten Speicher- und Kommunikationsressourcen liegt hierbei ein Hauptaugenmerk auf der Entwicklung eines effizienten Protokolls zur Kommunikation der Änderungen und einer sparsamen Speicherung der dazu nötigen Metadaten.

Effiziente Synchronisation von Dateien in verteilten Systemen

Bearbeitet von: Thorsten Schütt, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Das Management großer Datenmengen spielt eine immer wichtigere Rolle. Für das DataGrid-Projekt ist es beispielsweise notwendig, große Datenmengen auf mehrere Rechenzentren in Europa zu verteilen und die Daten untereinander zu synchronisieren. Auch innerhalb von Clustern gewinnen mit zunehmender Knotenanzahl Werkzeuge zur effizienten Synchronisation und Verteilung von Daten an Bedeutung.

Im Rahmen dieses Projekts wurde ein effizientes Verfahren zur Synchronisation ver-

teilter Verzeichnisstrukturen entwickelt und implementiert. Das Verfahren benötigt zur Synchronisation keine zentrale Instanz, wodurch eine verbesserte Skalierbarkeit erreicht werden konnte. Dabei wurden Erkenntnisse aus der Graphentheorie eingesetzt und weiterentwickelt, um die Netzwerktopologie und Übertragungsbandbreite zwischen den Rechnern zu berücksichtigen (Gossip). Durch die Verwendung einer Offline-Synchronisation werden Änderungen erst dann an andere Rechner propagiert, wenn der Nutzer dies anstößt. Das kann zum Beispiel nach einer Transaktion mit Änderungen an mehreren Dateien erfolgen.

Die Projektergebnisse sind in [6] detailliert beschrieben und als Softwareprodukt auf den ZIB-Webseiten zum Download verfügbar.

Grid-Systeme mit Peer-to-Peer-Techniken

Bearbeitet von: Florian Schintke, Monika Moser, Thorsten Schütt, Jochen Witte

Mit dem zunehmenden Einsatz von Grid-Systemen im produktiven Betrieb rücken zwei Aspekte immer mehr in den Vordergrund: die Skalierbarkeit und die Zuverlässigkeit. Um beides zu erhöhen, werden zentrale, leistungs- und ausfallkritische Komponenten, wie beispielsweise der Meta Directory Server (MDS) in Globus, durch hierarchisch vernetzte Implementationen ersetzt.

Ein weitergehender Ansatz liegt in der Nutzung von Techniken aus dem Peer-to-Peer Computing (P2P). Die flachen, nicht-hierarchischen P2P-Systeme bieten sowohl eine gute Skalierbarkeit als auch eine verbesserte Ausfallsicherheit durch Redundanz. Jeder Peer führt denselben verteilten Algorithmus aus und handelt nach denselben Regeln. Die Gesamtheit der Peers erbringt den Dienst.

Grid-Systeme sind in der Regel sehr umfangreich und bieten eine Vielzahl von Diensten an. Wenn jeder Dienst durch ein einzelnes, speziell dafür ausgelegtes P2P-System erbracht wird, erhält man ein Komponentenmodell, in dem jede (verteilte) Komponente einem P2P-Dienst entspricht. Ähnlich dem erfolgreichen UNIX-Toolset-Ansatz wird dadurch die Komplexität der einzelnen Dienste reduziert, was eine erhöhte Robustheit zur Folge hat. Weitere Informationen finden sich in den Proceedings [5].

Publikationen

- [1] S. Graupner, V. Kotov, A. Andrzejak, and H. Trinks. Service-centric organization of globally distributed computing. *IEEE Internet Computing, special issue on "Grid Computing"*, 7(4):36–43, July/August 2003.
- [2] Felix Hupfeld. Hierarchical structures in attribute-based namespaces and their application to browsing. Report 03–06, ZIB, 2003.
- [3] Alexander Reinefeld and Florian Schintke. Grid Computing in Deutschland. *Spektrum der Wissenschaft*, pages 72–73, July 2003.

- [4] Florian Schintke and Alexander Reinefeld. Modeling replica availability in large data grids. *Journal of Grid Computing*, 1(2):219–227, 2003.
- [5] Florian Schintke, Thorsten Schütt, and Alexander Reinefeld. A framework for self-optimizing grids using P2P components. In *14th Intl. Workshop on Database and Expert Systems Applications (DEXA'03)*, pages 689–693. IEEE Computer Society, September 2003.
- [6] Thorsten Schütt, Florian Schintke, and Alexander Reinefeld. Efficient synchronization of replicated data in distributed systems. In Peter M.A. Sloot et al., editors, *Computational Science - ICCS 2003, Part I*, volume 2657 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 274–283. Springer, June 2003.

2.2.13 Cluster Computing und Anwendungen

Über neunzig Prozent der in der aktuellen TOP-500-Liste verzeichneten Hochleistungsrechner enthalten Standard-CMOS-Prozessoren, die primär für den Massenmarkt entwickelt und produziert worden sind. Die Prozessorfamilien Intel IA-64 und AMD x86-64 sind ernstzunehmende Alternativen zu den traditionellen Supercomputer-Prozessoren, insbesondere wenn sie über ein schnelles Kommunikationsnetzwerk (Infiniband, Myrinet 2000, QS-Net) miteinander verbunden sind. Da Cluster-Systeme durch den Einsatz von Massenprodukten ein besseres Preis/Leistungsverhältnis aufweisen, erfreuen sie sich zunehmender Popularität.

Problematisch bleibt allerdings ihre Einbindung in den regulären Rechenzentrumsbetrieb mit einer größeren, heterogenen Benutzerschaft. Die derzeit vorhandenen Ressourcen-Managementsysteme sind kaum für einen effektiven Einsatz in diesem Umfeld geeignet, insbesondere wenn die Cluster in einem dezentralen Verbund betrieben werden. Aus diesem Grund liegt einer unserer Arbeitsschwerpunkte in der Entwicklung von Methoden zur Integration von Clustern als Rechen- und Speicherknoten in das Grid. Im Berichtszeitraum haben wir sogenannte Information Provider entwickelt, die dem Informationsaustausch zwischen Grid und Cluster dienen. Auch erste Ansätze zum Co-Scheduling, d.h. der Ablaufplanung zusammengehöriger paralleler Prozesse eines Jobs, haben wir entwickelt.

Vor dem Hintergrund immer komplexerer und immer umfangreicherer Cluster-Systeme kommt der automatischen Überwachung, Fehleranalyse und Fehlerbehebung eine große Bedeutung zu. Unsere zukünftigen Forschungsarbeiten werden daher stärker in den Bereich des „Autonomic Computing“ übergehen. Wie weiter unten im Projekt DataGrid beschrieben, haben wir bereits Systemarchitekturen zur autonomen Softwarekonfiguration entwickelt.

Auf diesen Forschungsarbeiten aufsetzend dienen die parallelen Threading-Algorithmen, die in der BCB-Nachwuchsforschergruppe „Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern“ entwickelt werden, als komplexe Demonstrator-Anwendungen zur Evaluierung unserer Managementkonzepte für HPC-Cluster. Die

parallelen Threadingalgorithmen sind besonders kommunikationsintensiv, sowohl im Hinblick auf das zu bewegendes Datenvolumen als auch auf die Kommunikationslatenzzeit.

DataGrid - Research and Technological Development for an International Data Grid

Bearbeitet von: Thomas Röblitz, Janis Bardins, Jörg Meltzer, Karl Pauls, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Kooperationspartner: CERN (Schweiz), PPARC (United Kingdom), INFN (Italien), CNRS (Frankreich), NIKHEF (Niederlande), ESA/ESRIN (Italien), IBM (United Kingdom), Compagnie des Signaux (Frankreich), Datamat (Italien), Helsinki Institute of Physics and CSC (Finnland), Swedish Natural Science Research Council (Schweden), Instituto Trentino di Cultura (Italien), KIP (Heidelberg), CEA/DAPNIA (Frankreich), IFAE Barcelona (Spanien), CNR (Italien), CESNET (Tschechien), KNMI (Niederlande), SARA (Niederlande), SZTAKI (Ungarn)

Förderung: Europäische Union

Im DataGrid-Projekt (www.eu-datagrid.org) sind unter Federführung des CERN mehr als 170 Wissenschaftler aus 21 Institutionen beschäftigt. Ziel des Projektes ist es, für die nächste Generation von Kernteilchen-Experimenten auf dem Large Hadron Collider (LHC) des Cern die zur Datenauswertung erforderliche Rechnerinfrastruktur zu entwickeln und den Physikern zur Verfügung zu stellen. Die prognostizierte Datenmenge von mehreren Petabyte (10^{15} Byte) pro Jahr ist derart hoch, dass selbst die weltweit leistungsstärksten Supercomputer zur Auswertung der Daten nicht mehr ausreichen. Zur Lösung dieser internationalen Herausforderung werden einige tausend handelsübliche PCs zu Clustern verbunden und in sogenannten „Tier 1 Regionalzentren“ für die Datenauswertung betrieben. Zusammen mit den Clustern der kleineren „Tier 2 Zentren“ werden ab dem Jahr 2006/07 weltweit insgesamt ca. 50.000 PCs für die Datenanalyse zur Verfügung stehen. Alle Regionalzentren sind über eine Grid-Software miteinander verbunden, so dass die Jobs der Physiker an beliebigen Orten gerechnet werden können.

Unsere Aufgabe im DataGrid-Projekt liegt in der Integration der lokalen Cluster in das Grid. In unserer Architektur [5] steuert ein leistungsfähiger Scheduler, der Maui-Scheduler, das Starten und Beenden von Benutzerjobs über eine neu entwickelte Softwareschicht. Diese bietet den Vorteil, dass verschiedene Ressourcen-Managementsysteme leicht integriert werden können. Darüber hinaus stellt sie eine einheitliche Schnittstelle für die Planung und Ausführung administrativer Aufgaben zur Verfügung, um z.B. das virtuelle An- und Abschalten von Rechenknoten für geplante Wartungsarbeiten in die Job-Abfolge einzubringen. Im Berichtszeitraum haben wir unsere Software um eine Schnittstelle für die Kopplung mit dem Accounting-System des DataGrid-Projektes erweitert. Unsere Ergebnisse haben wir in einem Beitrag auf der Konferenz Cluster 2003 vorgestellt.

Ein Problem besteht in dem automatischen Auffinden verfügbarer und passender Ressourcen für die Ausführung neuer Jobs. Die im DataGrid-Projekt entwickelten „Information Provider“ haben wir an das sogenannte GLUE-Schema angepasst. Dieses Schema wurde in Kooperation verschiedener internationaler Grid-Projekte entwickelt und soll die Benutzung weltweiter Ressourcen vereinfachen.

Co-Reservierung von Ressourcen im Grid

Bearbeitet von: Thomas Röblitz, Janis Bardins, Jörg Meltzer, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Kooperationspartner: Tony Gargya (IBM)

Förderung: IBM Deutschland Entwicklungs GmbH, Böblingen

Nachdem das Grid-Computing lange Zeit nur im akademischen Umfeld genutzt wurde, engagiert sich nun auch die Industrie auf diesem Gebiet, um zum Beispiel im sogenannten Utility Computing den Nutzern flexibel Rechenleistung anbieten zu können. Dabei ist die Fähigkeit, einmal getroffene Vereinbarungen (zum Beispiel hinsichtlich der Erfüllung der Rechenzeitanforderungen) einzuhalten, ein ganz zentraler Aspekt. Reservierungen von Ressourcen sind eine Möglichkeit, solche Vereinbarungen zu gewährleisten.

In diesem Projekt [5] werden Methoden für die Reservierung von Ressourcen im Grid entwickelt und getestet. Eine besondere Eigenschaft der betrachteten Reservierungen ist ihre komplexe Gestalt. So sollen z.B. mehrere Ressourcen, die zu unterschiedlichen oder gleichen Zeiträumen benötigt werden, in Form einer einzigen Reservierung behandelt werden können. Zusätzlich sollen Präferenzen der Nutzer, z.B. hinsichtlich der Reservierungszeit und der Reservierungskosten, berücksichtigt werden. Zunächst sollen effiziente Algorithmen für die Aushandlung einer Reservierung entwickelt werden. Anschließend werden diese in existierende Grid-Middleware zur Unterstützung komplexer Reservierungen integriert.

Modellierung des Applikationsbedarfs gemeinsam genutzter Ressourcen

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Mehmet Ceyran, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: Hewlett-Packard Labs

Die Erfahrung zeigt, dass die Ressourcen in industriellen wie auch wissenschaftlichen Rechenzentren nicht immer vollständig genutzt werden. Insbesondere in Rechenzentren großer Firmen, wie Federal Express oder Volkswagen, wird oftmals jeder Anwendung wie z.B. der Lohnbuchhaltung oder dem Webserver ein eigener Rechner zur Verfügung gestellt. Bei derartigen Anwendungen, die immer laufen müssen, wie auch bei periodisch wiederkehrenden Rechenjobs ergeben sich große Ersparnispotentiale durch die gemeinsame Nutzung von Ressourcen. Bei gleich bleibendem Bedarf kann auf diese Weise die Anzahl der benötigten Server reduziert werden. Dieser als Serverkonsolidierung bezeichnete Vorgang ist aus Gründen der Wirtschaftlichkeit besonders interessant im Bereich des Utility Computing, wo Rechenressourcen von Drittanbietern geleast werden.

Das Projekt [1, 2, 6] verfolgt drei Ziele. Zunächst soll der Bedarf an Ressourcen geeignet modelliert werden, um Voraussagen über erwartetes künftiges Verhalten der Applikationen treffen zu können. Die Abbildung 2.43 zeigt ein Bedarfsprofil, das Voraussagen über künftiges Verhalten ermöglicht. Auf der Basis dieser Daten soll dann eine langfristige Planung von benötigten Kapazitäten ermöglicht werden [6]. Für die kurzfristige Planung werden schließlich Algorithmen und Verfahren entwickelt, die die Zuteilung der Applikationen zu Ressourcen automatisieren [2].

Die Modellierung des Bedarfs erfolgt im Projekt auf Basis von sogenannten Kalender-Verfahren: eine feste Zeitperiode, z.B. ein Tag, wird in Abschnitte, z.B. jeweils eine Stunde, unterteilt. Anhand der historischen Daten wird dann der erwartete Bedarf jeder Applikation in jedem Abschnitt prognostiziert. Der aktuelle Forschungsgegenstand ist die automatische Klassifizierung von Applikationen in solche mit periodischem oder nichtperiodischem Verhalten, die Ermittlung von (ggf. hierarchischen) Periodenmustern im ersten Fall und die Modellierung durch Verfahren aus der Ökonometrie im anderen Fall.

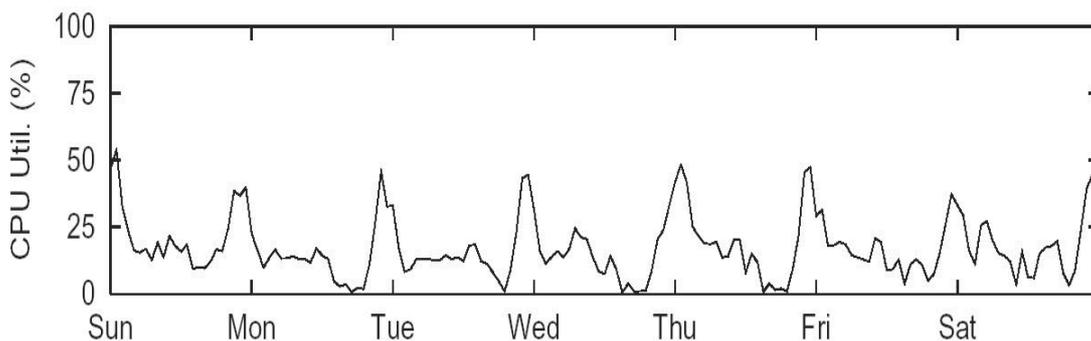


ABBILDUNG 2.43: Periodischer Rechenbedarf einer Applikation mit starkem Potential für Server-Konsolidierung

Für die kurz- und langfristige Planung wurde ein effizienter Scheduler entwickelt, der auf Basis von genetischen Algorithmen arbeitet. Die Geschwindigkeit dieses Schedulers ermöglicht eine Online-Berechnung der Zuordnung von Applikationen zu Ressourcen, wodurch auch die kurzfristige Planung abgedeckt wird. Eine Fallstudie hat gezeigt, dass die Qualität unwesentlich von den optimalen Lösungen abweicht, wobei die letzteren durch zeitaufwendiges quadratisches Programmieren gefunden wurden. Die künftige Forschung in diesem Teilbereich wird sich auf die Probleme der sogenannten Pareto-effizienten Optimierung und Zuordnung unter mehreren Gütekriterien konzentrieren.

BCB Nachwuchsforschergruppe „Alignment und Threading auf massiv-parallelen Rechnern“

Bearbeitet von: Thomas Steinke, Patrick May, René Heek, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: Freie Universität Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin Berlin-Buch, Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Technische Fachhochschule Berlin

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben, Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB)

Der Forschungsschwerpunkt der Junior Research Group “Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern” des “Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik” (BCB) liegt in der Entwicklung und Implementation von Algorithmen zur Proteinstruktur-Vorhersage. Darüber hinaus wird ein Applikationsportal für geeignete Bioinformatikanwendungen im BCB-Verbund aufgebaut.

Bei der Faltungserkennung (*Threading*) wird die drei-dimensionale räumliche Struktur eines Proteins (Target) aus dessen Aminosäuresequenz vorhergesagt. Dieses Verfahren bietet sich besonders dann an, wenn die Sequenzähnlichkeit mit Sequenzen bekannter Proteinstrukturen gering ist. Ziel der Faltungserkennung ist es, aus einer Menge von Proteinen mit bekannter Struktur (Templates) diejenige zu ermitteln, die der unbekannt Struktur am ähnlichsten ist. Die Template-Strukturen werden durch ihre Sekundärstrukturelemente (α -Helices und β -Stränge) sowie den räumlichen Nachbarschaftsbeziehungen zwischen ihnen modelliert. Die Ähnlichkeit zwischen Target-Sequenz und Template-Struktur wird dabei anhand einer heuristischen Scoring-Funktion bewertet, die einer Pseudo-Energie entspricht. Somit gilt es bei der Faltungserkennung dasjenige Template zu finden, das für die Target-Sequenz den günstigsten Energiewert besitzt.

Als Ansatz für die Scoring-Funktion geht man typischerweise von der inversen Boltzmann-Beziehung aus, die die Wahrscheinlichkeit eines Zustandes mit einer Energiedifferenz verknüpft. Bei der Faltungserkennung wird der Häufigkeit von strukturellen Eigenschaften, z.B. das Auftreten von Wasserstoffbrücken-Bindungen zwischen bestimmten Aminosäuren in einer Strukturdatenbank, eine Energiedifferenz zugeordnet.

Eine Zuordnung (Mapping) der Template-Struktur auf die Target-Sequenz nennt man Threading. Die Suche nach dem optimalen Threading für eine bestimmte Template-Struktur und eine Target-Sequenz ist in diesem Fall ein Minimierungsproblem. Die Suche nach dem optimalen Threading mit variabler Gap-Länge und paarweisen Kontakten ist NP-vollständig, aber der von uns verwendete Branch-and-Bound-Algorithmus ist insbesondere für kleinere Sequenzen in der Lage, schnell gegen das Minimum zu konvergieren. Aus dem optimalen Threading für jede Struktur der Template-Datenbank muss dann das globale optimale Threading ermittelt werden.

Im Berichtszeitraum haben wir unsere Version des Threading-Frameworks um eine weitere parallele Architektur ergänzt. Neben der bisherigen Master-Slave-Architektur haben wir eine zweite Strategie gemäß des Single-Program-Multiple-Data-Ansatzes

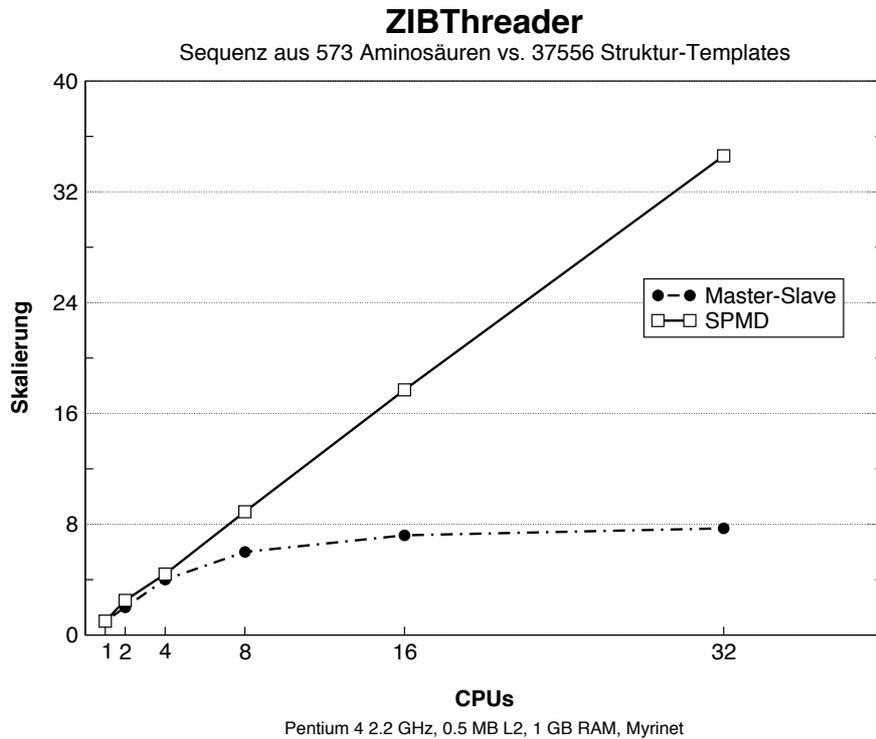


ABBILDUNG 2.44: Skalierungsverhalten des ZIBTHREADER für die Master-Slave- und die SPMD-Implementierung

(SPMD) verfolgt. Hierbei werden die Templates nicht dynamisch aus einer MySQL-Datenbank ausgelesen, sondern nach einem Präprozessierungsschritt statisch auf die Rechenknoten verteilt. Die Abbildung 2.44 zeigt die auf unserem Linux-Cluster erzielte Skalierung für beide Implementierungen. Neben der Verbesserung der Einzel-CPU-Leistung konnte die Skalierbarkeit unseres Threading-Cores deutlich verbessert werden. In der jetzigen Implementierung wird die Skalierung lediglich durch I/O-Wartezeiten und den Nachteil einer statischen Lastbalancierung begrenzt, was sich aber zumindest auf der gegebenen Cluster-Umgebung (noch) nicht bemerkbar macht.

Der durchgeführte FISCHER-Benchmark demonstrierte die erwartete Erkennung der Faltungstypen je nach Faltungsklasse bei 60-90%. Zur Verbesserung der Güte der Faltungserkennung müssen weitere Analysen der Sequenzdaten vorgenommen werden, wodurch letztendlich ein gekoppelter Datenfluss zwischen verschiedenen autonomen Programmen zustande kommt [3]. Zu diesem Zweck wurde mit der Evaluierung von Prozessmanagementsystemen im Kontext der Bioinformatik begonnen und speziell das BioOpera-System auf unserem Linux-Cluster installiert.

In Kooperation mit den BCB-Arbeitsgruppen Frömmel/Preissner (Charité/HUB) und

Leser (Informatik/HUB) wird die COLUMBA-Datenbank auf dem Frontend-Rechner unseres Clusters betrieben. Speziell haben wir am Entwurf und der Implementierung der Web-Schnittstelle von COLUMBA mitgearbeitet [4].

Publikationen

- [1] A. Andrzejak and K. Fukuda. Debugging distributed computations by reverse search. In *AI2003, Parallel and Distributed Computing and Networks (PD-CN'2003)*, LNCS, Februar 2003.
- [2] S. Graupner, A. Andrzejak, V. Kotov, and H. Trinks. Adaptive control overlay for service management. In *First Workshop on the Design of Self-Managing Systems (AASMS'03)*, LNCS, June 2003.
- [3] P. May and I. Koch. Ptgl - protein topology graph library. In *ECCB - Proc. of the European Conf. on Comp. Biology in conjunction with the French National Conference on Bioinformatics*, pages 193–194, September 2003.
- [4] K. Pother, S. Trissl, H. Müller, P. May, R. Heek, R. Preissner, T. Steinke, I. Koch, U. Leser, and C. Frömmel. Columba - a database of annotations of protein structure. In *ECCB - Proc. of the European Conf. on Comp. Biology in conjunction with the French National Conference on Bioinformatics*, pages 109–110, September 2003.
- [5] Thomas Röblitz, Florian Schintke, and Alexander Reinefeld. From clusters to the fabric: The job management perspective. In *IEEE International Conference on Cluster Computing Cluster'03*, pages 468 – 473, December 2003.
- [6] J. Rolia, A. Andrzejak, and M. Arlitt. Automating enterprise application placement in resource utilities. In A. Keller M. Brunner, editor, *14th IFIP/IEEE Workshop on Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2003)*, Heidelberg, volume 2867 of LNCS, pages 118–129. Springer Verlag, October 2003.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Karin Gatermann

- Zur Zeit Professur an der Georgia Tech University, USA und Ruf auf eine Professur (Canadian Research Chair, Tier 2) an der London University, Ontario/Canada

Hans-Florian Geerdes

- Diplomarbeitspreis 2003 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR)

- Hauptpreis anlässlich der Studentenkonzferenz Mathematik 2003 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV)

Hans-Christian Hege

- Bestellung zum Honorarprofessor für das Fach “Wissenschaftliche Visualisierung”, durch die German Film School – Staatlich anerkannte Hochschule für digitale Medienproduktion, Elstal

Sven Krumke

- Ruf auf eine C3-Professur “Wirtschaftsmathematik” an die Technische Universität Kaiserslautern

Andreas Tuchscherer

- Hauptpreis anlässlich der Studentenkonzferenz Mathematik 2003 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV)

WISSENSCHAFTLICHE DIENSTLEISTUNGEN

3.1 Überblick

Die Aktivitäten im Arbeitsbereich Wissenschaftliche Dienstleistungen konzentrierten sich in diesem Jahr auf den Vollausbau des KOBV (sowie seine Evaluation), die weitere Internationalisierung des Math-Net und auf die konsequente Fortschreibung der Aktivitäten im Museumsbereich. Einen weiteren Schwerpunkt bildete das Anwendungsprojekt Math&Industry, das eine Verbesserung der Kommunikation zwischen mathematischer Forschung und Industrie durch Einsatz von an Internet und World Wide Web orientierten Mitteln und Medien zum Inhalt hat.

Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin–Brandenburg (KOBV): Das Jahr 2003 war für den KOBV ein Jahr der Entscheidungen – im Herbst wurde die erste Evaluation des Verbundes durchgeführt. Im Laufe des Jahres stellte die KOBV-Zentrale eine Serie von innovativen Diensten für Bibliotheken und Nutzer bereit. Die wichtigsten sind – für Nutzer in einem neuen regionalen Portal zusammengefasst – die Internet-Dienste (<http://digibib.kobv.de>):

- KOBV-Suchmaschine mit neuer Oberfläche
- KOBV-Bibliothekenführer
- überregionaler Verbundkatalog Film (virtueller Fachverbund)
- ein experimenteller Portaldienst für elektronische Ressourcen der Bibliotheken (Navigation, Suche und Verlinkung)
- ein neuartiger Portaldienst für elektronische, im Internet frei zugängliche Journale

Auf der Tradition der KOBV-Suchmaschine aufbauend, verfolgt die KOBV-Zentrale das weitgesteckte Ziel, die elektronischen Ressourcen nicht nur nachzuweisen, sondern für die Nutzer zum nahtlosen anschließenden Zugriff zur Verfügung zu stellen. Bisher sind erst einige Ressourcen auf diese zukunftsweisende Art und Weise integriert.

Den KOBV-Bibliotheken hat die KOBV-Zentrale im gleichen Zuge eine Reihe weiterer, für bibliothekstechnische Zwecke gedachte Dienstleistungen bereitgestellt. Um die wichtigsten zu nennen:

- die Sequentiell Verteilte Suche als Werkzeug zur Fremddatenübernahme, die gleichzeitig die Konfiguration lokaler virtueller Katalogisierungsverbünde ermöglicht,
- die Metasuchmaschine (ZACK), ebenfalls als Werkzeug zur Fremddatenübernahme für Bibliotheken ohne Z39.50-Client,
- die in den Fernleihstellen der Bibliotheken durchgeführte Online-Fernleihe, die bis in die „separaten“ öffentlichen Verbünde Berlins und Brandenburgs hinein wirkt.

Alle diese Maßnahmen zielen im Verbund mit einer substantiellen Erweiterung des zentralen und des virtuellen Fremddatenangebots auf die Rationalisierung der Betriebsabläufe in den KOBV-Bibliotheken ab.

Mit derselben Zielsetzung hat die KOBV-Zentrale die folgenden überregionalen bzw. regionalen Projekte und Initiativen initiiert und definitorisch soweit vorangetrieben, dass sie förderfähig¹ sind:

- Ein BMBF-Projekt „Offene Navigation und Suchmaschinen für Verbünde, Konsortien und die Wissenschaften“, das als Vorprojekt zum Vorhaben Verteilter Zeitschriftenserver (VZS) der Verbünde erfolgreich war.
- Ein Vorhaben „Verteilter Dokumentenserver“ (VDS) der Verbünde, das aus der Konzeption des „Verteilten Zeitschriftenservers“ hervorgegangen ist und das die inhaltlichen Grundlagen für die inzwischen beschlossene Kooperation der Verbünde mit *vascoda* ist.
- Das Vorhaben „Virtueller Dokumentenspeicher“ (VDS des KOBV), das als Modell- und Integrationsvorhaben des VDS dessen thematischen Kern, den VZS mit seinem Berlin-Brandenburgischen Anteil umsetzen soll.

Die Konzepte des KOBV der offenen, dezentral organisierten und Internet-orientierten Kooperation fanden auch ihren Niederschlag in den neuen (im März 2004 verabschiedeten) DFG-Empfehlungen zum Informationsmanagement in wissenschaftlichen Bibliotheken, in dessen Kern die Konzeption eines Verteilten und kooperativ operierenden Content-Management steht.

IuK-Dienste für Mathematik und deren Anwendung in Industrie und Dienstleistungen: Die Schwerpunkte der Math-Net-Arbeitsgruppe liegen in der Entwicklung und im Aufbau leistungsfähiger Informationssysteme und Informationsdienstleistungen für die Mathematik und deren Anwendungen in Industrie und Dienstleistungen. Die Arbeitsgruppe hat wesentliche Beiträge geleistet, um qualitativ hochwertige Informationen für die mathematische Community bereitzustellen und die Kommunikation zwischen den Mathematikern weltweit zu verbessern.

¹Beim BMBF und der DFG wurden im Dezember 2003 Förderaufträge gestellt. Über die Bewilligung entscheiden die Förderer zu Beginn des Jahres 2004.

- Im vergangenen Jahr wurde der Server der International Mathematical Union (IMU) am ZIB neu aufgebaut, unter anderem wurden ein elektronischer Rundbrief für die mathematische Gemeinschaft und ein elektronisches Verzeichnis für Mathematiker eingerichtet.
- das Math-Net, als zentrales Portal zu den Web-Informationen mathematischer Institutionen (<http://www.math-net.org>), wurde weiter ausgebaut. Über den Math-Net-Dienst *Navigator* sind nahezu alle mathematischen Institutionen der Welt, die eigene Web-Server betreiben, erreichbar. Die Math-Net-Seite ist ein Vorschlag für eine standardisierte Strukturierung und Erschließung der Informationen. Durch diese Standardisierung lassen sich Suche und Navigation im Math-Net wesentlich verbessern. Mehr als 200 Institutionen haben diesen Vorschlag bisher aufgegriffen und Math-Net-Seiten installiert.
- Speziell für Projekte der angewandten Mathematik wurde im Rahmen von Math&Industry ein Konzept für eine umfassende Web-Präsentation entwickelt, das von der Darstellung des Problems über die Modellierung bis zur mathematischen Behandlung reicht.

Die Web-Präsentation soll insbesondere potentielle Anwender aus Industrie und Dienstleistungen ansprechen, die sich hier über ähnliche Probleme und deren Behandlung informieren können und Ansprechpartner für die Diskussion ihrer Probleme finden. Ein spezielles Feature sind die Glossare der zentralen Begriffe, die einen schnellen Einstieg in die Thematik ermöglichen.

Es wurden Werkzeuge zur Erstellung einheitlicher Web-Seiten für die Projekt-Präsentation entwickelt. In den Projekten des BMBF-Mathematikprogramms wurde damit begonnen, die Web-Präsentationen auf der Grundlage des in Math&Industry entwickelten Konzepts zu erstellen.

Neben den erwähnten Aktivitäten werden weitere Community-orientierte Informations- und Kommunikationsdienste vom ZIB angeboten und administriert, u.a. die elib-Softwarebibliothek oder die Opt-Net Mailing-Liste.

Museumsprojekt: Die Arbeitsgruppe „Informationstechnische Werkzeuge für Museen“ unterstützt verschiedene Museen unterschiedlicher Größenordnungen bei IT-gestützten Inventarisierungs- und Dokumentationsvorhaben. Außerdem wirken Mitglieder des Projekts in verschiedenen Arbeitsgruppen mit, die sich mit den Grundlagen und der Standardisierung der Beschreibung von Museumsobjekten beschäftigen. Durch enge Kontakte zu auf nationaler und internationaler Ebene auf diesem Gebiet aktiven Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund (DMB) und dem „International Committee for Documentation of the International Council of Museums“ (CIDOC) hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation jährlich abgehaltene Herbsttagung zur Museumsdokumentation findet bereits seit 10 Jahren traditionell im ZIB statt.

Das Museumsprojekt richtet seine service-orientierten Entwicklungen von Organisations- und Multimediawerkzeugen für Museen in erster Linie an den Bedürfnissen einer Vielzahl auch kleinerer Museen aus, denen sonst der Zugang zur Nutzung moderner Informations- und Kommunikationstechnologien verschlossen bleiben würde. Basissoftware für alle diese Projekte ist das ursprünglich von der britischen Museum Documentation Association (MDA) entwickelte Datenbanksystem GOS, welches vom ZIB konsequent weiterentwickelt wird. Einen weiteren Schwerpunkt bildet die Unterstützung der Museen bei der Präsentation ihrer Bestände im Internet. Das bekannteste Beispiel hierfür ist die Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums, die im Rahmen eines Kooperationsprojektes vom ZIB entwickelt wurde.

Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.7 des Computeralgebrasystems REDUCE weiterentwickelt, Fehler behoben und es wurden neue Anwendungsprojekte begonnen oder fortgeführt. Es wurde die Fertigstellung der Version 3.8 vorbereitet, deren Freigabe für das erste Quartal 2004 vorgesehen ist.

Einen immer größeren Stellenwert für mathematische Software nimmt die Verfügbarkeit der Standards MathML des W3C und OpenMath ein. Dies kommt auch durch die Förderung des Esprit Thematic Networks OpenMath durch die EU zum Ausdruck. Durch die Entwicklung von REDUCE ist das ZIB daran beteiligt. Insbesondere MathML ist im letzten Jahr ein Standard in der Softwareindustrie geworden.

Im Berichtszeitraum wurden auch die Aktivitäten im Bereich der parallelen Computeralgebra wiederaufgenommen. Eine enge Zusammenarbeit besteht dabei vor allem mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf in St. Catharines, Kanada. Dessen Universität verfügt über einen neuen, kostengünstigen Parallelrechner vom Typ Beowulf.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Elke Durek (bis 09/2003), Hildegard Franck, Martin Grötschel, Lavinia Hodoroba, Andres Imhof (ab 04/2003), Uta Kaminsky, Zara Kanaeva (ab 04/2003), Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Litsche (bis 07/2003), Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Christian Oesterheld (ab 11/2003), Raluca Rascanu, Beate Rusch

Kooperationspartner: Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin; Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg; Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Das Jahr 2003 stand für den KOBV im Zeichen der Evaluation, deren Durchführung in der Vereinbarung zwischen den Ländern Berlin und Brandenburg sowie dem ZIB vom 20.08.2001 festgeschrieben ist. Im Auftrag der beiden Länder hat Ende September eine Gruppe von fünf auswärtigen Gutachtern die zweitägige Evaluation und Ende

November ein Nachgespräch mit den Beteiligten durchgeführt: den beiden Ländervertretern, dem Kuratorium, der KOBV-Zentrale und dem ZIB. Das von den Gutachtern zum Jahresende 2003 vorgelegte Gutachten enthält die grundlegenden Empfehlungen zur Fortführung des KOBV und zur weiteren Ansiedlung der KOBV-Zentrale am ZIB.

Seit dem Aufbau des KOBV hat die Region einen entscheidenden Schritt hin zu einer modernen, an den zeitgemäßen Nutzerbedürfnissen ausgerichteten Informationsinfrastruktur getan. Mit der KOBV-Suchmaschine und dem KOBV-Bibliothekenführer hat der KOBV zwei Internet-Dienste entwickelt und ausgebaut, die das Auffinden von Literatur in Berlin und Brandenburg und die Suche nach spezifischen Bibliotheken rund um die Uhr und an jedem Ort ermöglichen. Den Bibliotheken bieten die Internet-Dienste eine regionale Plattform, die den Bekanntheitsgrad der einzelnen Bibliothek - insbesondere einer kleinen oder spezialisierten Einrichtung - beträchtlich erhöht. Im Jahre 2003 hat sich die Zahl der Mitglieder um 11 Spezialbibliotheken auf insgesamt 46 Bibliotheken erhöht - darin eingeschlossen alle Hochschulbibliotheken und universitären Bibliothekssysteme der Region sowie drei Bibliotheken mit Gaststatus. Zu dieser Zahl hinzuzurechnen sind der Verbund Öffentlicher Bibliotheken Berlin mit 13 Stadtbibliotheken und 120 Einzeleinrichtungen sowie der Verbund der öffentlichen Bibliotheken im Land Brandenburg mit 160 Stadt- und Kreisbibliotheken.

Im August 2003 hat die KOBV-Zentrale als weiteren Internet-Dienst den Verbundkatalog Film in Betrieb genommen. Dieser virtuelle Katalog bietet die parallele Suche speziell nach Filmen (DVD/Videos) und Filmliteratur in deutschen Bibliotheken. Er wird im Rahmen eines neuen - für die beteiligten Bibliotheken kostenpflichtigen - Dienstes aufgebaut, dem Hosting-Service für virtuelle Fachverbände. Die internen Strukturen für den regulären Betrieb des Hosting-Services werden in der KOBV-Zentrale im Rahmen eines zweijährigen Projektes von Januar 2003 bis Dezember 2004 geschaffen. Die Bibliotheken der Arbeitsgemeinschaft Filmbibliotheken, ein loser, überregionaler Zusammenschluss von Filmbibliotheken, sind die ersten Partner dieses Dienstes. Technisch werden für den Hosting-Service Standard-Funktionalitäten genutzt, die auch in der KOBV-Suchmaschine zum Einsatz kommen: Clustering und parallele Suche. Das Kuratorium hat die Initiative der KOBV-Zentrale ausdrücklich begrüßt. Mit dem neuen Service kann sich der KOBV ein weiteres Standbein schaffen, das über die Region hinausgeht.

Ein Schwerpunkt im Betriebsbereich war im Berichtszeitraum die Migration auf MetaLib Version 2.14. Die Software MetaLib ist im Zuge des KOBV-Projektes von der KOBV-Zentrale gemeinsam mit der Firma Ex Libris entwickelt worden und wurde seit Herbst 2001 in der Version 1.2 für die Web-Funktionalitäten der KOBV-Suchmaschine eingesetzt. Mit Version 2 hat Ex Libris tiefgreifende Umstrukturierungen in der internen Systemarchitektur von MetaLib vorgenommen, so dass in der KOBV-Zentrale intensive Testläufe für die einzelnen Migrationsschritte notwendig waren. Neben erweiterten Recherchemöglichkeiten bietet MetaLib 2.14 verschiedene Funktionalitätserweiterungen im Hinblick auf den Einsatz als Portalsoftware wie den Zugriff auf elektronische Ressourcen und elektronische Journale sowie die verbesserte Integra-

tion der kontext-sensitiven Linking-Software SFX. Im Dezember 2003 hat die KOBV-Zentrale die Migration mit der Inbetriebnahme des KOBV-Portals abgeschlossen. In das KOBV-Portal sind die KOBV-Suchmaschine und der Verbundkatalog Film integriert. Die Migration des Gemeinsamen Index auf das neue Ex Libris-Produkt Union Catalog Package verzögerte sich aufgrund fehlender Softwarebestandteile ein weiteres Mal und konnte nicht – wie ursprünglich geplant – bis zum Jahresende 2003 abgeschlossen werden.

Die im Jahre 2002 gemeinsam von der KOBV-Zentrale und den KOBV-Bibliotheken gestartete Initiative zur Optimierung der Fremddatenübernahme brachte im Jahre 2003 wesentliche Fortschritte durch die Inbetriebnahme verbesserter Werkzeuge für die Remote-Datenübernahme über das Internet. Seit Ende Juni 2003 nutzen die Bibliotheken die Sequentiell Verteilte Suche über Z39.50, die von der KOBV-Zentrale bereits während des KOBV-Projektes konzipiert und von Ex Libris als Bestandteil der KOBV-Suchmaschine in der im Herbst 2002 ausgelieferten Aleph Version 14.2 implementiert wurde. Für Bibliotheken, die keinen Z39.50-Client haben, stellt die KOBV-Zentrale das Werkzeug ZACK bereit, das in seiner optimierten Version ZACK II im Dezember 2003 in Testbetrieb genommen wurde. Beide Werkzeuge erlauben mehr als „nur“ die rationelle Recherche und komfortable Übernahme strukturierter Datensätze (Copy Cataloging) per Knopfdruck. Mit der Sequentiell Verteilten Suche und ZACK II hat die KOBV-Zentrale zwei Werkzeuge zur Personalisierung der Fremddatenübernahme geschaffen: Jede Bibliothek kann ihren eigenen, spezifischen „virtuellen Verbund“ zur schnellen und qualitativ hochwertigen Fremddatenübernahme aufbauen, indem sie für das Absuchen der Fremddatenbanken eigene Profile definiert und sich – je nach Bedarf – spezifische virtuelle Fremddatenpools im Internet zusammenstellt. Durch Absprache mit den deutschen Bibliotheksverbänden zur Online-Übernahme der jeweiligen Verbunddaten hat die KOBV-Zentrale gleichzeitig das Fremddatenangebot von bisher 26 Millionen bibliographischer Datensätze auf rund 80 Millionen erhöht. Die Maßnahmen zur Optimierung der Fremddatenübernahme sind noch nicht abgeschlossen, sondern werden über den Berichtszeitraum hinweg weitergeführt.

Ein weiterer Schritt zur Unterstützung der Bibliotheken in der Rationalisierung ihrer internen Prozesse war im Jahre 2003 die Inbetriebnahme der Online-Fernleihe durch die KOBV-Zentrale. Mitte September 2003 ist Phase II des Projektes Online-Fernleihe, d.h. Online-Bestellungen durch die Fernleihstellen der Bibliotheken, erfolgreich angelaufen. Zum Jahresende 2003 haben bereits 19 von insgesamt 23 fernleihberechtigten wissenschaftlichen Bibliotheken in der Region die Online-Fernleihe praktiziert – und damit alle fernleihrelevanten wissenschaftlichen Bibliotheken, deren Bestände im Internet nachgewiesen sind. Noch in der – positiv verlaufenden – Testphase befanden sich zum Jahresende die fernleihberechtigten öffentlichen Bibliotheken im Land Brandenburg. Für den Verbund der öffentlichen Bibliotheken im Land Brandenburg (VÖB) hat die KOBV-Zentrale in 2003 in Zusammenarbeit mit der Fachstelle ein spezielles, VÖB-internes Verfahren mit einem separaten Fernleihkreis realisiert, damit auch kleine, nicht fernleihberechtigte Bibliotheken die fortschrittliche Technik der Online-

Fernleihe nutzen können. Die Überleitung zur KOBV-Fernleihe erfolgt über die zum Leihverkehr zugelassenen Leitbibliotheken. Durch die Automatisierung der Fernleihe entstehen – neben der Beschleunigung der Fernleihe – in den Bibliotheken Rationalisierungseffekte durch das Wegfallen von Signierarbeiten und durch die Verschlankung von Geschäftsgängen. Diese können noch vergrößert werden, wenn die Nutzer die Fernleihbestellungen selbst aufgeben. Die Vorbereitungen für diese dritte Phase des Projektes, die endnutzerbasierte Online-Fernleihe, hat die KOBV-Zentrale ebenfalls noch im Berichtszeitraum abgeschlossen, so dass die Bibliotheken im Dezember 2003 mit den Tests beginnen konnten.

Während die Aktivitäten im Projekt Online-Fernleihe weiterlaufen, hat die KOBV-Zentrale das Entwicklungsprojekt „KOBV-Informationsportal“ im Berichtszeitraum abgeschlossen und im Dezember 2003 planmäßig das „KOBV-Portal – Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg“ in einer ersten Ausbaustufe in Routinebetrieb genommen. Zielsetzung war der Aufbau eines kooperativen regionalen Portals mit Einsatz von Linking-Mechanismen zur „nahtlosen“ Navigation in freien und lizenzierten Dokumenten und mit Einsatz von Instrumenten zur dezentralen Authentifizierung und Autorisierung über das Internet. Dieses Ziel konnte im Rahmen des Projektes nur zum Teil realisiert werden. Wie im Laufe des Projektes bereits absehbar, war die Problematik der verteilten Authentifizierung und Autorisierung während der Projektlaufzeit nicht abschließend zu bearbeiten. Eine weitere Zielstellung, der Gesamtnachweis der regionalen Ressourcen, wird sich erst mittel- bis langfristig realisieren lassen. Das KOBV-Portal bietet in seiner jetzigen Grundaustufe den Überblick über die in den großen Bibliotheken nachgewiesenen Ressourcen und elektronischen Zeitschriften, zudem die nahtlose Navigation mittels des Reference-Linking-Werkzeuges SFX zu verschiedenen Diensten wie Fernleihe, Subito und freien Volltexten im Internet sowie zu frei zugänglichen elektronischen Zeitschriften.

Ein weiteres Entwicklungsprojekt hat die KOBV-Zentrale im Berichtszeitraum erfolgreich abgeschlossen, das Projekt „Verteilter Contentspeicher (VCS)“, das als Vorprojekt zum Projekt „Verteilter Zeitschriftenserver“ im IV. Quartal 2002 angelaufen war und für das die KOBV-Zentrale BMBF-Mittel eingeworben hatte. Im Zuge des VCS-Projektes hat die KOBV-Zentrale die Suchmaschinen-Software FAST evaluiert, den Content von Verlagen anhand der Datenlieferungen des Verlages Kluwer analysiert und erste Erfahrungen mit dem Aufbau eines Speichers für Verlagsdaten gesammelt.

Die Ergebnisse aus dem VCS-Projekt können „nahtlos“ weiter genutzt werden im Entwicklungsprojekt „Virtueller Dokumentenspeicher des KOBV (VDS des KOBV)“ und die geleisteten Vorarbeiten und das aufgebaute Wissen für die Weiterarbeit an diesem Projekt herangezogen werden. Zielsetzung des Projektes ist es, den langfristigen Zugriff auf lizenzierte elektronische Zeitschriften der Verlage sicher zu stellen und elektronische Dokumente der KOBV-Bibliotheken mit moderner Informationstechnologie zugänglich zu machen. Für das Projekt „VDS des KOBV“ hat sich im Berichtszeitraum – als Teilprojekt des Projektes „Verteilter Dokumentenspeicher (VDS)“, vormals „Verteilter Zeitschriftenserver (VZS)“, der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme –

auf überregionaler Ebene eine völlig neue Konstellation ergeben. Seit September 2003 haben sich die AG der Informationsverbände, die Virtuellen Fachbibliotheken und die AG der Verbundsysteme unter Einbeziehung der Bibliotheken in Vascoda zusammen geschlossen mit der Zielsetzung, eine „Digitale Bibliothek Deutschland“ aufzubauen. BMBF und DFG werden bei der Förderung von Vascoda gemeinsam vorgehen. In diesem Rahmen sollen für die Durchführung des Projektes „VDS des KOBV“ DFG-Mittel eingeworben werden.

3.2.2 Informationssysteme für die Mathematik

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Winfried Neun, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) der International Mathematical Union (IMU), Fachgruppe “Information und Kommunikation” der Deutschen Mathematiker-Vereinigung/Österreichischen Mathematischen Gesellschaft

2003 hat die International Mathematical Union (IMU) das ZIB gebeten, den Webauftritt der IMU zu überarbeiten und dessen Betreuung zunächst bis zum Jahr 2006 zu übernehmen. Die IMU hat dazu dem ZIB zwei Rechner bereitgestellt.

Die Internet-Präsentation der IMU² hat zum Ziel:

- Informationen über die IMU selbst und ihre Aktivitäten bereitzustellen
- eine Plattform für die Kommunikation zwischen Mathematikern in aller Welt aufzubauen

Das Konzept und die Strukturierung des IMU-Servers setzen auf den Vorarbeiten in Math-Net auf.

Mit dem IMU-Net wurde ein elektronischer Newsletter geschaffen, der Mathematiker aus aller Welt über neue Entwicklungen aus dem Bereich der Mathematik, z.B. Konferenzen, informiert. IMU-Net ist in den Server der IMU integriert, das ZIB ist für die technische Betreuung des Newsletters verantwortlich.

Der erste Rundbrief erschien im September 2003. Bisher haben etwa 4.000 Mathematiker den Newsletter subskribiert.

Eine der wesentlichen publizistischen Aktivitäten der IMU war die Herausgabe des World Directory of Mathematicians, eines Verzeichnisses der Mathematiker aus aller Welt. Die IMU hat 2002 aus Kostengründen beschlossen, diese Aktivität einzustellen. Mit dem Electronic World Directory of Mathematicians (EWDM) wurde im Rahmen der Internetpräsentation der IMU eine kostengünstige Alternative geschaffen: Mathematiker aus aller Welt können sich im EWDM registrieren. Dazu sind nur minimale Informationen (Name, E-Mail, Land) anzugeben. Sie können außerdem einen Link auf

²<http://www.mathunion.org>

ihre Homepage setzen, um mehr Informationen über Forschungs- und Lehrtätigkeit anzubieten. Seit Ende letzten Jahres haben sich mehr als 600 Mathematiker im EWDM registriert.

Gleichzeitig wurde ein Muster für eine standardisierte Mathematiker-Homepage entwickelt, das die typischen Informationen eines Mathematikers, wie etwa die Forschungsgebiete und -interessen, die Liste der Publikationen oder Informationen zu den Lehrveranstaltungen erfasst. Es wurde ein Werkzeug entwickelt, das eine einfache Erstellung einer solchen standardisierten Homepage ermöglicht.

Wie oben schon erwähnt, sind die Aktivitäten, die die IMU- Internetpräsentation betreffen, konzeptionell und technisch eng mit den Math-Net-Aktivitäten verbunden. Math-Net strebt an, die Bereitstellung der Informationen der mathematischen Institutionen im Internet zu koordinieren und einen nutzerfreundlichen Zugang zu den Informationen zu bieten.

Im Mittelpunkt der Math-Net-Aktivitäten des letzten Jahres stand der Ausbau des Math-Net-Navigators. Bis dato beschränkte sich der Math-Net-Navigator auf die Aufzählung der Institutionen, die über eine Math-Net-Seite verfügten. Um auch weitere Institutionen einzubeziehen, wurde der Math-Net-Navigator im letzten Jahr um Länderlisten erweitert, die alle mathematischen Institutionen auflisten, die Web-Server betreiben. Die Listen wurden aus verschiedenen Quellen, u. a. aus Google und der Liste mathematischer Institutionen der Pennsylvania State University generiert. Die Länderlisten werden automatisch aktualisiert und gepflegt.

Der Navigator bietet sowohl eine nutzerfreundliche Navigation über die mathematischen Institutionen als auch eine Suchfunktion an. Für die Suche werden die Informationen der im Navigator gelisteten mathematischen Institutionen gesammelt und indiziert. Das geschieht mittels der Harvest-Software. Falls die Dokumente durch Metadaten erschlossen sind, lassen sich erweiterte Suchfunktionalitäten implementieren.

Um die Suche und die Präsentation der Treffer aber auch für Dokumente zu verbessern, für die keine Metadaten verfügbar sind, wurde mit der Entwicklung von Methoden begonnen, die auf dem so genannten Page Ranking beruhen, also einer Analyse der Links, die von einem Dokument ausgehen bzw. auf ein Dokument zeigen.

Elektronische Information und Kommunikation steht in allen Wissenschaften vor ähnlichen Problemen, die von der Erstellung bis zu den Zugangsbedingungen zu wissenschaftlichen Informationen reichen. Deshalb unterstützen die DMV und das ZIB fachübergreifende Aktivitäten zur Verbesserung der wissenschaftlichen Information, insbesondere die IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften in Deutschland. Die DMV und das ZIB tragen durch Vorträge – etwa auf den Tagungen der IuK-Initiative – und durch Mitarbeit in der IuK-Kommission aktiv zur Stärkung der wissenschaftlichen Information und Kommunikation in Deutschland bei.

3.2.3 Math&Industry – Anwendungen der Mathematik im Web

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Winfried Neun, Martin Grötschel, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg, Fachbereich Mathematik der Universität Freiburg

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Das Projekt Math&Industry zielt auf eine umfassende, anwenderfreundliche und standardisierte Internet-Präsentation der Projekte des Mathematik-Programms des BMBF ab. Damit kann der Zugang zu den Informationen der Projekte entscheidend verbessert werden. Interessenten aus Industrie und Dienstleistungen können sich über die für sie relevanten Projekte informieren, Kontakte zu den Projekten aufnehmen und Projektergebnisse nutzen.

Der Schwerpunkt der Arbeiten im Math&Industry-Projekt lag im letzten Jahr auf

- der Weiterführung der konzeptionellen Arbeiten für die Projekte, insbesondere für die Glossare,
- der Fertigstellung der Erstellungswerkzeuge für die lokalen Projektpräsentationen,
- dem Aufbau des zentralen Portals von Math&Industry.

Die Projekte der BMBF-Mathematikprogramme sind anspruchsvoll: Es geht um die wissenschaftliche Aufbereitung, Modellierung und Lösung realer Probleme aus Industrie und Dienstleistungen. Eines der wesentlichen Hindernisse für eine erfolgreiche Lösung der gestellten Aufgaben: Anwender und Wissenschaftler müssen eine gemeinsame Sprache finden. Natürlich stehen auch potentielle Interessenten vor dieser Hürde.

Glossare, die die wichtigsten Begriffe der Projekte umfassen, können dazu beitragen, die Sprachbarrieren schnell zu überwinden. Der Ansatz für das Glossar in Math&Industry beinhaltet

- eine Definition der Begriffe,
- eine Zuordnung der Begriffe zum Anwendungsbereich oder zu einer Wissenschaft,
- eine Darstellung der Zusammenhänge mit anderen Begriffen.

Insbesondere der letzte Punkt, die Relationen zwischen Begriffen, kann sehr viel zur automatischen Verknüpfung verschiedener Projekte beitragen. Das setzt allerdings eine Beschränkung auf wenige zentrale Relationen voraus. Die inhaltliche Diskussion über die Glossare und die Entwicklung eines Werkzeugs zum Erstellen der Glossare war sehr zeitintensiv, konnte aber im letzten Jahr abgeschlossen werden.

Die Software für die Glossare ist Teil des Web Site Makers, eines Werkzeugs, das die Erstellung einer vollständigen Web-Präsentation für ein Projekt ermöglicht.

Mittels des Web Site Makers ³ werden

- (X)HTML-Seiten für die verschiedenen Punkte der Projektpräsentationen erzeugt,
- Metadaten zu diesen HTML-Dokumenten erstellt (das geschieht in Form von RDF-Dateien, einem Web-Standard zur inhaltlichen Erschließung von Daten),
- eine Homepage für die Projektpräsentation generiert,
- die Navigationsleisten auf den Web-Seiten administriert.

Der Web Site Maker wurde im letzten Jahr fertiggestellt und freigegeben. Es wurden damit Projekt-Präsentationen für die mehr als 50 Projekte der 3. Förderperiode des Mathematik-Programms des BMBF erstellt.

Diese Projekt-Präsentationen sind die Basis für den Aufbau des zentralen Portals von Math&Industry. ⁴

Das zentrale Portal bietet verschiedene Navigationsmöglichkeiten über die Projekte, z.B. Listen der Projekte in den einzelnen Förderperioden. Auch eine Volltextsuche ist implementiert. Weitere Funktionalitäten, etwa zum Suchen und Browsen in den Glossaren, sind in Vorbereitung.

3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: C. Saro, R. Stein, D. Jung, Marc Schwer (bis März 2003), Ronni Grapenthin (ab Juni 2003)

Kooperationspartner: Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IfM), Bayerisches Nationalmuseum (BNM), Deutsches Historisches Museum (DHM), Deutsches Hygiene Museum Dresden (DHMD), Museum im Wasserwerk (Friedrichshagen), Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG (Bielefeld), Kulturhistorisches Museum Rostock, Stadtgeschichtliches Museum Leipzig, Pommersches Landesmuseum Greifswald, Medizinhistorisches Museum Berlin

Aufgabe der Arbeitsgruppe ist die Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen. In interdisziplinärer Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern verschiedener geisteswissenschaftlicher Fachrichtungen werden Projekte durchgeführt, die den Museen die Nutzung moderner Informationstechnik erschließen. Durch enge Kontakte zu entscheidenden Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und der CIDOC (International Committee for Documentation of the International Council of Museums), hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe

³http://soft-pc3.zib.de/create_website

⁴<http://www.mathematik-21.de>

Dokumentation jährlich im Herbst durchgeführte Tagung findet seit mehr als 10 Jahren traditionell am ZIB statt.

Die im Rahmen der genannten Fachgruppe gegründete Arbeitsgruppe „Daten-austausch“ wird vom ZIB koordiniert. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit den Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten. Ein Ziel ist die Überprüfung der Praxistauglichkeit des von der CIDOC entwickelten objektorientierten „Conceptual Reference Model“ (CRM), welches sich zur Zeit im Prozess der Normierung durch die ISO befindet (<http://cidoc.ics.forth.gr>). Dieser wird von einer internationalen Special Interest Group (SIG) begleitet, an der sich auch das ZIB beteiligt. Das Modell versteht sich als „domain ontology“ (im informationstechnischen Sinn) und ermöglicht das Verständnis und den Vergleich unterschiedlicher Ansätze zur Datenstrukturierung.

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 Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Weitere wichtige Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum (seit 1991), dem Bayerischen Nationalmuseum in München (seit 1995), dem Deutschen Hygienemuseum Dresden (seit 1997), dem Museum im Wasserwerk Friedrichshagen (seit 1998) und dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig (seit 2001) sowie mit einigen anderen Museen. Die Arbeitsgruppe finanziert sich weitgehend aus Drittmitteln.

Basissoftware für alle Projekte ist das von der britischen Museum Documentation Association (MDA) speziell für den Einsatz zur Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS. Es ermöglicht die Verarbeitung komplexer Informationsstrukturen und erlaubt dadurch die Beschreibung auch komplizierter Objektzusammenhänge ohne Informationsverlust. Das Programm wird bereits seit 1981 vom ZIB weiterentwickelt.

Durch den modularen Aufbau kann es leicht erweitert und an individuelle Bedürfnisse und neue technische Gegebenheiten angepasst werden. Aus diesem Grund ist GOS auch im Studiengang Museumskunde an der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft (FHTW) Berlin sowie an der Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur (HTWK) Leipzig im Einsatz, um exemplarisch Lösungswege für Probleme der Inventarisierung aufzuzeigen.

Die im April 1996 (als erste derartige Anwendung in Deutschland) eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen Historischen Museums umfasst dank der kontinuierlichen Verbesserung und Erweiterung inzwischen über 320.000 Datensätze mit etwa 150.000 digitalisierten Objektbildern <http://www.dhm.de/datenbank/>. Sie bildet damit ungebrochen das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Die Nutzung liegt mit 2.000 – 5.000 Anfragen pro Woche weiterhin sehr hoch. Auch die Internet-Datenbank des Bildarchivs am Deutschen Historischen Museum

<http://www.dhm.de/datenbank/bildarchiv.html> mit der Möglichkeit zur Bestellung von Bildern über das Internet erfreut sich dieser guten Akzeptanz (auch hier 2.000 – 4.000 Anfragen pro Woche). Ähnliche Anwendungen wurden für das Deutsche Hygienemuseum in Dresden (www.dhmd.de) und das Institut für Museumskunde entwickelt.

Die in den Vorjahren entwickelte Intranet-Anwendung (am Deutschen Historischen Museum) wurde ebenfalls weiter ausgebaut. Sie ermöglicht einen sehr einfachen und schnellen Zugang zu der Originaldatenbank auch für Mitarbeiter, die mit der verwendeten Datenstruktur nicht vertraut sind und wird besonders zur Ausstellungsvorbereitung intensiv genutzt. Vergleichbare Anwendungen wurden für das Deutsche Hygienemuseum Dresden sowie das Stadtgeschichtliche Museum Leipzig geschaffen.

3.2.5 REDUCE

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Herbert Melenk

Kooperationspartner: Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), Wolfram Koepf (Universität / GH Kassel), James H. Davenport und John P. Fitch (University of Bath, England), Arthur C. Norman (Cambridge, England), Eberhard Schrüfer (FhG-SCAI, Bonn), Fritz Schwarz (FhG-SCAI, Bonn), Andreas Dolzmann, Thomas Sturm (Universität Passau), Francis Wright (Queen Mary College, London) und Thomas Wolf (Brock University, St. Catharines, Ontario, Kanada, ZIB-Fellow) Beiträge von zahlreichen Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien, und vielen europäischen Ländern.

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt von REDUCE liegt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen befindet sich am ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über das Web abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweiten Update). Im Berichtszeitraum wurde die Version REDUCE 3.8 fertiggestellt und die Software wird im ersten Quartal 2004 freigegeben.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Sein Programm MOLEC, das zusammen mit Mitarbeitern des TECFLAM Projekts vor ca. 10 Jahren entwickelt wurde, befindet sich noch im Einsatz und soll im Rahmen eines Projekts mit der Universität Heidelberg auf neuere Hardware portiert werden.

In Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf wurde für die Brock University in St. Catharines, Kanada ein System zur computergestützten Bewertung der mathematischen Vorkenntnisse der Studenten der Universität weiterentwickelt. Dieses System verbindet Methoden der Computeralgebra (implementiert in REDUCE) mit Techniken

des World Wide Webs um den Zugang zu dem System für die Studenten einfach zu gestalten. Wesentlich für dieses System ist auch die Unterstützung des Aufgabenstellers z.B. durch automatisches Generieren von Aufgaben nach Vorgabe eines Schwierigkeitsgrads.

Ebenfalls in Zusammenarbeit mit Thomas Wolf wurden Arbeiten zur *parallelen Computeralgebra* wiederbelebt, die in der Mitte der neunziger Jahre ihren Ursprung hatten. Der Anlass war die aktuelle Verfügbarkeit von preiswerten und sehr leistungsfähigen Parallelsystemen (sog. *Beowulf Cluster*), die auch kleinen Instituten die Anschaffung eines Parallelrechners erlaubt. Dadurch wird parallele Computeralgebra wesentlich weiter verbreitbar als es bisher möglich war. Thomas Wolf hat eine experimentelle parallele Version seiner Software CRACK erstellt. Im Berichtszeitraum wurde der Beowulf CLuster mit leistungsfähigerer Hardware nachgerüstet.

Die *Präsentation des Systems im World Wide Web* (WWW) ist an vielen Serversystemen zugänglich. Einige REDUCE URLs sind:

<http://www.uni-koeln.de/REDUCE>

oder <http://www.zib.de/Optimization/Software/Reduce>

Die Information wird im wesentlichen an der Universität zu Köln, am ZIB und bei RAND Corp. gepflegt. An der Umstellung der gesamten Information auf HTML bzw. Nachfolgeprodukten (wie OpenMath oder MathML) wird gearbeitet.

In Zusammenarbeit mit Fritz Schwarz von FhG Institut SCAI und mit finanzieller Unterstützung durch die Fraunhofer Gesellschaft wurde am ZIB ein REDUCE Testserver installiert, der das in REDUCE eingebettete System ALLTYPES potenziellen Benutzern zum Test anbietet.

Im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft geförderten Projekts **OpenMath** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Das ZIB beteiligt sich am Thematisches Netzwerk OpenMath mit der Integration von OpenMath Standards in REDUCE.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 21.000,- Euro erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat neben den Upgrades für die neue Version (seit Sommer 1999) die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegsversion, die bei einem Preis von 99 \$ auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht. Die neue Version REDUCE 3.8 sollte in 2004 zu höheren Einnahmen führen.

Publikationen

- [1] A.C. Hearn, *REDUCE User's and Contributed Packages Manual, Version 3.7*, Santa Monica, ZIB reprint, 2nd edition, 2000.

SUPERCOMPUTING UND NETZE

4.1 Hochleistungsrechner am ZIB

Der Berliner Landeshochleistungsrechner ist ein verteiltes System aus mehreren Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Es besteht zum einen aus dem im Jahr 2002 im Rahmen des HLRN-Verbunds (Kapitel 4.1.1) beschafften massiv parallelen System IBM pSeries 690 und aus dem im Januar 2004 nach einer Betriebszeit von sechs Jahren stillgelegten Parallelrechner CRAY T3E.

Der Parallelrechner CRAY T3E, der ursprünglich bereits zum Jahreswechsel 2002/2003 außer Betrieb genommen werden sollte, war noch während des gesamten Jahres 2003 voll ausgelastet und wurde schließlich im Januar 2004 endgültig stillgelegt. Die hohen Kosten für den Betrieb dieses sechs Jahre alten Rechners, insbesondere für Strom und Wartung, ließen sich gegenüber dem besseren Leistungs-/Kostenverhältnis des nunmehr stabilen IBM-Systems nicht mehr rechtfertigen.

Mit der Stilllegung der CRAY T3E endet für das ZIB eine fast zwanzigjährige Zusammenarbeit mit der Fa. CRAY. Im April 1984 wurde im ZIB mit dem Vektorrechner CRAY 1-M der leistungsfähigste Rechner in Norddeutschland in Betrieb genommen. Mit einer Prozessortaktzeit von 12 ns (entspricht 83 MHz) erreichte dieses System eine Peak-Performance von 160 MFlop/s, der Hauptspeicherausbau betrug 8 MByte. Mit dem ersten massiv parallelen System im ZIB, der CRAY T3D, gelang es im November 1995, das leistungsfähigste System in Deutschland zu betreiben und international den Platz 31 der 6. TOP500-Liste zu belegen.

Wir haben ein Chassis der CRAY T3E mit mehreren Boards und Prozessoren — zusätzlich zu dem bereits vorhandenen CRAY X-MP-System — im Gebäude des ZIB der Öffentlichkeit zugänglich gemacht.

4.1.1 Hochleistungsrechner Nord (HLRN)

Gemäß der Vereinbarung der sechs norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein wird der HLRN-Rechner als verteilter Supercomputer an den Standorten ZIB/Berlin und RRZN/Hannover betrieben. Die sechs Länder teilen sich die Investitionskosten in Höhe von ca. 20 Mio. Euro, während die Standländer Berlin und Niedersachsen zusätzlich

die laufenden Kosten (Wartung, Strom, Klima, usw.) tragen.

Der HLRN-Supercomputer (der „Gesamtkomplex“, vgl. Abbildung 4.1) besteht aus den beiden gleichen Teilsystemen („Teilkomplexen“) in Berlin und Hannover sowie der dedizierten Datenverbindung („HLRN-Link“). Er bietet mit seinen insgesamt 832 Power4-Prozessoren (Stand Dezember 2003) eine Spitzenleistung von über 4 TFlop/s. Im Jahr 2004 werden weitere sechs gleichartige Regatta-H-Knoten mit insgesamt zusätzlichen 192 Prozessoren installiert, außerdem wird das derzeit installierte Colony-Netzwerk gegen das neue, leistungsfähigere Federation-Netzwerk ausgetauscht.

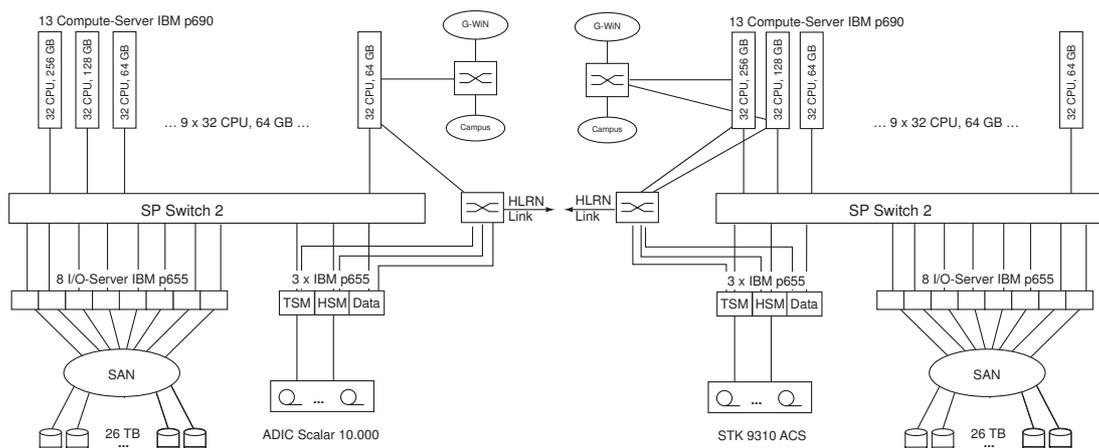


ABBILDUNG 4.1: Konfiguration des HLRN-Systems, Stand 31.12.2003

Die folgenden Angaben beziehen sich auf den Berliner Teilkomplex:

- Compute Server: 13 Compute Server IBM pSeries 690 (Regatta-H) mit je 32 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz), davon elf Systeme mit je 64 GByte, ein System mit 128 GByte und ein System mit 256 GByte Hauptspeicher; derzeit wird die Mehrzahl der Server in vier Partitionen (Knoten) mit je acht Prozessoren aufgeteilt (vgl. Abbildung 4.2).
- Internes Verbindungsnetzwerk: SP Switch2 (Colony) bestehend aus zwei unabhängigen Netzwerkebenen, maximale Anwendungsbandbreite zwischen zwei Knoten: ca. 280 MByte/s, Latenzzeit für den Transfer zwischen zwei Knoten: $< 20\mu s$.
- I/O Server: Elf I/O Server IBM pSeries 655 mit je vier Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz) für den Zugang zum parallelen Dateisystem, zu den Magnetbandsystemen sowie für externe Datenzugriffe.
- Dateisysteme: 16 FAST500 Fibre-Channel Plattensysteme mit insgesamt 26 TByte Plattenkapazität, maximale I/O-Durchsatzleistung 1,7 GByte/s, aufgeteilt in unterschiedliche Dateisysteme für kurzfristige und langfristige Datenhaltung.



ABBILDUNG 4.2: IBM p690 am ZIB, ©Peter Meißner, Berlin

- Magnetbandarchivsystem: STK 9310 ACS mit 15 Magnetbandgeräten vom Typ 9940 B mit einer Datenrate von je 30 MByte/s und einer Kapazität von 12.000 Stellplätzen für Magnetbandkassetten; derzeit für das HLRN-System neun Magnetbandstationen mit 600 Magnetbändern mit je 200 GByte Kapazität.

Als Verbindung der beiden ca. 300 km voneinander entfernten Teilkomplexe dient ein angemieteter dedizierter transparenter WDM¹-Kanal des Gigabit-Wissenschaftsnetzes mit einer möglichen Bandbreite von 2,4 Gbit/s, derzeit wird Gigabit-Ethernet-Technik mit einer Bandbreite von 1 Gbit/s bei einer Latenzzeit von ca. 4,5 ms (Round-Trip) eingesetzt. Über den HLRN-Link werden die Dienste Datei-Transfer, direkte MPI-Kommunikation und das gemeinsame Scheduling-System „LoadLeveler“ auf der Basis von IP-Diensten mit privaten IP-Adressen genutzt.

Der Benutzer erreicht das HLRN-System über ausgezeichnete Einwählknoten („Login Nodes“) *berni.hlrn.de* und *hanni.hlrn.de*, welche über Gigabit-Ethernet-Verbindungen in die lokalen Netze von ZIB bzw. RRZN und damit über das Gigabit-Wissenschaftsnetz des Deutschen Forschungsnetzes angebunden sind. Üblicherweise arbeitet der Benutzer interaktiv auf einem dieser Einwählknoten und sendet Batch-Jobs mit Angabe von maximaler Rechenzeit und gewünschter Anzahl von Prozessoren zum HLRN-System.

Das HLRN-System unterstützt folgende Methoden der Parallelisierung:

¹Wavelength-Division-Multiplexing Wellenlängen-Multiplexing

- Kommunikation über gemeinsamen Speicher (Shared-Memory-Modell): SMP-Parallelisierung ist für Anwendungen mit bis zu 32 Prozessoren unter OpenMP möglich.
- Kommunikation über Knotengrenzen hinweg (Distributed-Memory-Modell): Nachrichtenbasierte Kommunikation ist für Anwendungen mit sehr großem Parallelitätsgrad (bis zu 512 Prozessoren) unter MPI möglich.
- Kommunikation über den HLRN-Link: Zusätzlich zu diesem nativen MPI-Protokoll stehen für Anwendungen, die mehr als 512 Prozessoren benötigen, der dedizierte HLRN-Link mit MPI oder anderen Methoden über IP zur Verfügung.

Die Kommunikationsmethoden können auch kombiniert angewendet werden, beispielsweise in Form der Hybridparallelisierung, d.h. knoteninterne SMP-Parallelisierung und knotenexterne MPI-Nutzung auch über Komplexgrenzen hinweg.

Das HLRN-System wird als ein gemeinsames virtuelles System betrieben. Die Ein-System-Eigenschaft wird durch die folgenden Maßnahmen und Software-Mechanismen realisiert:

- gemeinsame Benutzerverwaltung,
- systemweite Bereitstellung der Heimat-Dateisysteme,
- Benutzerzugang über ein gemeinsames Batch-System (LoadLeveler),
- identische Versionen der eingesetzten System- und Anwendungssoftware.

Im Rahmen einer Kooperation mit IBM und dem DFN-Verein wird das Projekt „Virtueller Supercomputer Berlin-Hannover“ durchgeführt, vgl. Kap. 4.3.1.

Nach der Installation im Sommer 2002 konnte im 3. Quartal 2002 ein Testbetrieb mit Benutzern aus den sechs beteiligten Bundesländern aufgenommen werden, von Anfang an auch als ein echtes paralleles System mit MPI-Kommunikation über (damals) alle 48 Rechenknoten eines jeden Teilkomplexes. Mit den Erfahrungen aus dem Testbetrieb stellten im 1. Quartal 2003 ca. 60 Wissenschaftler vornehmlich aus den Fachgebieten Chemie, Physik einschl. Astrophysik, Klima- und Meeresforschung sowie Strömungsmechanik beim Wissenschaftlichen Ausschuss (siehe Kapitel 4.1.2) Anträge auf Zulassung auf das HLRN-System.

Im Betrieb und in der Betreuung dieses verteilten Systems durch Mitarbeiter an unterschiedlichen Standorten liegen die Schwerpunkte derzeit neben dem eigentlichen Betrieb auch in der Erstellung einer ausführlichen weborientierten Benutzerdokumentation (<http://www.hlrn.de/doc/>), der intensiven Beratung der Benutzer durch Experten der jeweiligen Fachrichtung und einer automatisch erstellten weborientierten Information über den Status des Systems einschließlich seiner wichtigsten Komponenten (<http://www.hlrn.de/status/>).

Leider zeigte sich der Betrieb dieses IBM-Systems in 2003 noch nicht so stabil, wie wir es von unseren bisherigen Systemen gewöhnt waren: Instabilitäten machten einen

Umbau der Teilkomplexe erforderlich. In der ursprünglichen Konfiguration dienten alle Rechenknoten gleichzeitig auch als Server für das parallele Dateisystem GPFS, wodurch eine besonders hohe Übertragungsleistung zu den Dateisystemen erreicht wurde. Dieses im Prinzip funktionsfähige Konzept hatte sich aber als zu störanfällig erwiesen. Nach eingehender Analyse der Störfaktoren wurde mit IBM vereinbart, durch zusätzliche dedizierte I/O-Knoten die Rechenknoten von der Serverfunktion für GPFS zu entlasten. Dafür war ein Umbau wesentlicher Teile der bisherigen Installation sowie eine vollkommene Neuverkabelung der Plattensysteme erforderlich. Im Zusammenhang mit dem Umbau wurde auch der 13. Compute Server pSeries 690 in Betrieb genommen.

Der Umbau wurde im September 2003 für den Teilkomplex in Hannover (*hanni*) und im November 2003 für den Teilkomplex in Berlin (*berni*) durchgeführt. Während der Unterbrechung stand für die HLRN-Benutzer stets die halbe Rechenleistung zur Verfügung. Um diese effizient nutzen zu können, wurden vor der jeweiligen Betriebsunterbrechung die für die Benutzer relevanten Dateien zum weiterhin betriebsbereiten Komplex (ca. 5 TByte Daten) kopiert und nach der Unterbrechung wieder zurück kopiert. Damit konnte der Benutzerbetrieb weitgehend - wenn auch nur mit halbiertes Kapazität - in der gewohnten Umgebung durchgeführt werden.

Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung des Hochleistungsrechners liefert die Tabelle 4.1.

	HLRN-System IBM pSeries 690
Betriebssystem	AIX
Systemsoftware	GPFS, LoadLeveler, PE, PSSP
Compiler	XL C, Visual Age C++, XL Fortran
Programm-entwicklung	HPM, PAPI, TotalView, VaMPIr
Tools	ACTC Tools, Global Arrays, Linux Toolbox, METIS, MPI, netCDF, PVM, UDUNITS
Numerik	ATLAS, Aztec, BLACS, ESSL, FoSSI, LAPACK, NAG Fortran Library, PeIGS, PETSC, RAMG, ScaLAPACK
Visualisierung	Animation, EnSight, FERRET, GrADS, Ncview
Ingenieurwissenschaften	ABAQUS, Comet, FLUENT, GAMBIT, StarCD, ANSYS (teilweise nur <i>hanni</i>)
Chemie	CPMD, GAMESS-UK, Gaussian98, MOLPRO, NAMD, NWChem, TURBOMOLE, VMD

Tabelle 4.1: Software-Ausstattung des Hochleistungsrechners

4.1.2 Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte

Wissenschaftlicher Ausschuss

Der Verwaltungsrat des HLRN hat den Wissenschaftlichen Ausschuss am 30.09.2002 als unabhängiges Gremium für den HLRN eingesetzt. Der Ausschuss besteht aus elf Wissenschaftlern, die auf den relevanten Gebieten des HPC fachlich ausgewiesen sind; es sind alle am HLRN-Verbund beteiligten Bundesländer vertreten. Der Ausschuss bewertet die wissenschaftliche Relevanz jedes Forschungsvorhabens mit erheblichem Ressourcenbedarf (Großprojekt) und die Eignung der Aufgabenstellung für die Lösung mit Hochleistungsrechnern. Auf der Grundlage dieser Bewertung, des begründeten Ressourcenbedarfes und der im HLRN verfügbaren Kapazität teilt der Ausschuss Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Der Ausschuss hat nach seiner Konstituierung unter dem Vorsitz von V. Linke erstmalig im Februar 2003 über die Vergabe von Kontingenten an Großprojekte entschieden und tagt seitdem quartalsweise.

Großprojekte

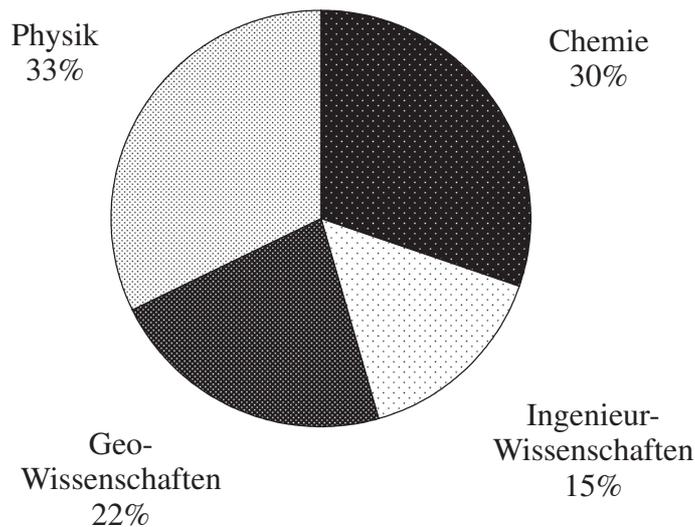


ABBILDUNG 4.3: Nutzung des HLRN-Systems im Jahr 2003 nach Fachgebieten

Das HLRN-System wurde im Berichtszeitraum von 72 Großprojekten aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie sowie Geowissenschaften (insbesondere Meeres- und Umweltforschung) genutzt. Die anteilige Nutzung ist in Abbildung 4.3 aufgeführt. In der Erprobungs- und Vorbereitungsphase befinden sich auch Projekte aus bisher nicht vertretenen Fachgebieten wie Biologie, Bioinformatik, Elektrotechnik, Humanmedizin, Mathematik und Wirtschaftsinformatik. Der Gesamtbedarf übersteigt die vorhandene Rechenkapazität um ein Vielfaches. Das Antragsvolumen

beträgt regelmäßig das Dreifache der verfügbaren Kapazität.

Den folgenden elf größten Projekten wurden auf dem HLRN-Rechner in den Quartalen 2/2003 bis 4/2003 jeweils 95000 NPL² bewilligt; das sind ca. 76% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Wissenschaftlichen Ausschuss bewilligten Rechenkapazität:

- Physik: *Determination of the Decay Constant of the D_s -Meson*, HU Berlin, 12.500 NPL.
- Geowissenschaften: *Untersuchung der Struktur des turbulenten Transports über inhomogener Unterlage. Simulation der Grenzschichtturbulenz*, Universität Hannover, 6.000 NPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen*, HU Berlin, 5.200 NPL.
- Chemie: *Periodische Dichtefunktionalrechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxiden*, HU Berlin, 5.000 NPL.
- Physik: *Topology, Chiral Physics and Hadron Masses from Overlap Fermions*, FU Berlin, 5.000 ZPL.
- Physik: *Ab-initio Simulationen des Wachstums von High-K Gateoxiden auf Silizium*, TU Clausthal, 4.500 NPL.
- Klimawissenschaften: *Grobstruktursimulationen zur Untersuchung des Energie-Imbalanz-Problems*, Universität Hannover, 4.500 NPL.
- Physik: *Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX*, Universität Hamburg, 3.300 NPL.
- Chemie: *Quantenchemie und Quantendynamik von Wasserstofftransfermodellsystemen*, FU Berlin, 3.000 NPL.
- Chemie: *Zuverlässige Rechnungen zur molekularen Paritätsverletzung*, TU Berlin, 3.000 NPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes*, TU Berlin, 2.600 NPL.

Exemplarisch stellen wir im folgenden einige der oben aufgeführten Großprojekte vor. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektbearbeitern bei Antragstellung verfasst worden.

²NPL - Norddeutsche Parallelrechner Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

Determination of the Decay Constant of the D_s -Meson

Bearbeitet von: Ulli Wolff, Humboldt-Universität zu Berlin

The problems we are concerned with arise from quantum chromodynamics (QCD), the theory which is widely believed to be governing the behavior of quarks. It describes how quarks join in groups of two or three and build particles, the so-called hadrons. Two prominent representatives of these hadrons are the proton and the neutron, the particles the nucleon in an atom basically is built of.

In our project we aim at a numerical high precision determination of the decay constant F_{D_s} of the D_s -meson.

Another essential objective of our project is the extrapolation of the decay constant in $1/M_q$ towards heavier quarks. That means, into the range of B-physics where lattice data is still not reliable and experimental data for F_B raw. Together with results from the static approximation ($M_q = \infty$) we plan to present a fit for the functional dependence of the decay constant on $1/M_q$. This will permit to cut down errors on F_B .

Untersuchung der Struktur des turbulenten Transports über inhomogener Unterlage, Simulation der Grenzschichtturbulenz

Bearbeitet von: Siegfried Raasch, IMUK, Universität Hannover

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Bestimmung der Verdunstung über heterogenen Landoberflächen aus Beobachtungen und durch numerische Modellierung. Die räumliche Skala ist die Gitterbox eines atmosphärischen regionalen Zirkulationsmodells oder ein Satellitenbildpixel. Es sollen Parametrisierungsansätze für atmosphärische und hydrologische Modelle entwickelt werden, die den Austausch von Wasser, Wärme und Impuls am Erdboden repräsentativ für Gitterelemente beschreiben. Da die Verdunstung eine Komponente der Energie- und Wasserbilanz der Landoberfläche darstellt, müssen notwendigerweise auch die turbulenten Flüsse von Wärme und Impuls sowie Gebietsmittel der Strahlungskomponenten und des Niederschlages betrachtet werden. Die Ergebnisse der Projektes werden für die regionale numerische Wettervorhersage und für die Klimamodellierung zur Verfügung gestellt. Die Untersuchung der turbulenten Grenzschicht erfolgt mittels des LES-Modells PALM, welches am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover entwickelt wurde. Die raum- und zeitlich hochaufgelösten Simulationen (bis zu $1000 \times 1000 \times 500$ Gitterpunkte) können in akzeptabler Rechenzeit nur auf einem Parallelrechner durchgeführt werden, wie er im HLRN verwendet wird. So wurden bereits Rechnungen mit PALM auf der Cray-T3E am RRZN und am ZIB, als auch im Probetrieb des HLRN durchgeführt.

Periodische Dichtefunktionalrechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxiden

Bearbeitet von: Maria Veronica Ganduglia-Pirovano, Humboldt-Universität zu Berlin

Viele industrielle Katalysatoren sind Materialien aus unterschiedlichen chemischen

Substanzen. Sie bilden komplexe chemische Gemische. Unsere Forschung widmet sich dem Verständnis der Reaktivität und Selektivität katalytisch aktiver Materialien im Zusammenhang mit Festkörperstruktur und chemischer Zusammensetzung. Dieses Verständnis ist notwendig, um veränderte oder neue Katalysatoren herstellen oder effizientere chemische Prozesse maßschneidern zu können. Wir kombinieren DFT-Berechnungen, wie in VASP und CPMD implementiert, und statistische Thermodynamik, um die Struktur von Vanadiumoxiden zu untersuchen. Vanadiumoxide werden häufig geträgert (z. B. auf Al_2O_3) eingesetzt. Sie spielen eine große Rolle bei der Herstellung von wichtigen Chemikalien sowie dem Abbau der Umweltverschmutzung.

Im stationären Zustand während der Katalyse liegt das Vanadium der Katalysatoren auf Vanadiumoxid-Basis in verschiedenen Oxidationsstufen vor. Viele vorgeschlagene Reaktionsmechanismen beinhalten das Entfernen eines Sauerstoffatoms als einen kritischen Schritt. Einerseits untersuchen wir die Defektbildung durch die Entfernung von Sauerstoffatomen an der $\text{V}_2\text{O}_5(001)$ Oberfläche sowie die Stabilität teilweise reduzierter Oberflächen unter bestimmten Sauerstoff-Partialdrücken und bei bestimmten Temperaturen. Andererseits untersuchen wir die strukturellen, elektronischen und Schwingungseigenschaften von geträgerten Vanadiumoxidfilmen auf Aluminiumoxid, um Unterschiede zwischen dem Verhalten des Einkristalls und geträgertem Vanadiumoxid mit dem katalytischen Verhalten korrelieren zu können. Das Verständnis der Rolle des Trägers ist eine Schlüsselfrage in der heterogenen Katalyse.

Abbildung 4.4 zeigt die Energie für die Entfernung eines einfach koordinierten Vanadyl-Sauerstoffatoms von der einkristallinen $\text{V}_2\text{O}_5(001)$ -Oberfläche sowie von geträgerten Vanadiumoxiden (mit und ohne Berücksichtigung der Gitterrelaxation). Sauerstoff kann am leichtesten von der einkristallinen Oberfläche entfernt werden. Das liegt an der Möglichkeit der Bindungsbildung des reduzierten Vanadiumatoms zu einem weiteren Sauerstoffatom. Der Träger läßt diese Wechselwirkung nicht zu. Der Energieaufwand für die Sauerstoffentfernung wird zwar höher, könnte dadurch aber die Selektivität erhöhen.

1. V. Brázdová, M. V. Ganduglia-Pirovano und J. Sauer: Periodic density functional study on structural and vibrational properties of vanadium azide aggregates, *Phys. Rev. B*, submitted.
2. M. V. Ganduglia-Pirovano und J. Sauer: Stability of reduced $\text{V}_2\text{O}_5(001)$ surfaces, *Phys. Rev. B*, submitted.
3. A. Hofmann und J. Sauer: The surface structure of hydroxylated and sulfated zirconia. A periodic density functional study, *J. Phys. Chem. B*, submitted.
4. T. Kumanova-Todorova, M. V. Ganduglia-Pirovano und J. Sauer: Surface termination of epitaxial V_2O_3 films on $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$, *J. Phys. Chem. B*, in preparation.

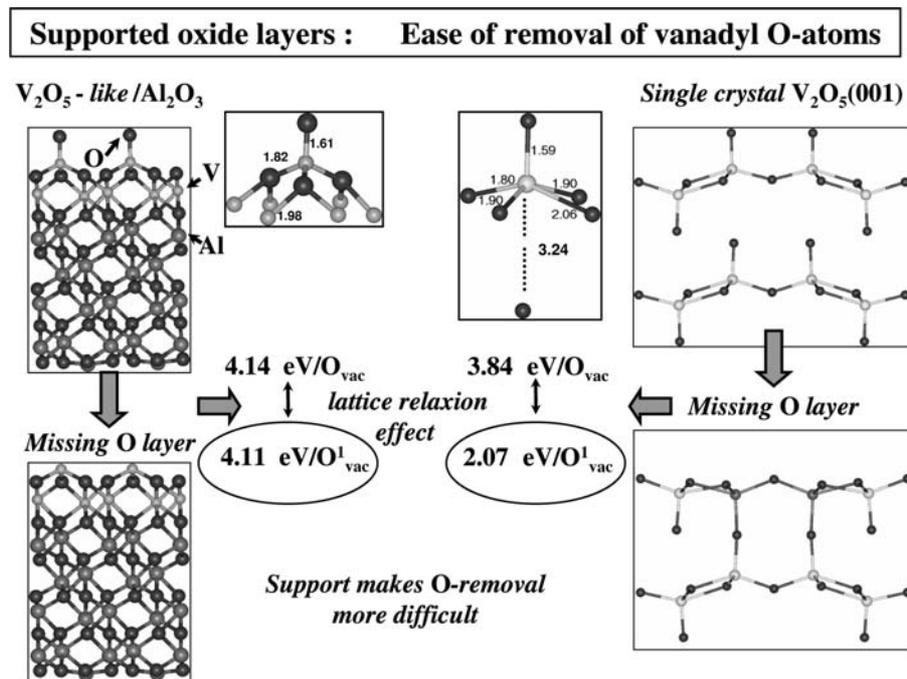


ABBILDUNG 4.4: Berechnete Energien für die Entfernung eines einfach koordinierten Vanadyl-Sauerstoffatoms von der einkristallinen $V_2O_5(001)$ -Oberfläche (rechts) sowie von geträgerten Vanadiumoxiden (links).

Topology, Chiral Physics and Hadron Masses from Overlap Fermions

Bearbeitet von: Volkard Linke, Freie Universität Berlin

We use the overlap Dirac operator in order to investigate the relation between gauge field topology and chiral physics in quenched QCD. This includes the determination of the chiral condensate from the spectrum of the Dirac operator and the examination of the influence of the topological charge of the gauge fields on hadronic correlation functions. Furthermore, we want to compute hadron masses in a mass region where we can make contact with (quenched) chiral perturbation theory in order to be able to extrapolate our results to the chiral limit.

Ab-initio Simulationen des Wachstums von High-K Gateoxiden auf Silizium

Bearbeitet von: Peter E. Blöchl, Technische Universität Clausthal

Die anhaltende Miniaturisierung von Halbleiterbauelementen erfordert den Ersatz herkömmlicher Gateoxide durch sogenannte High-K Gateoxide. Herkömmliche Gateoxide, die auf Siliziumoxinitrid basieren, müssten in wenigen Jahren eine Dicke von nur wenigen Atomlagen haben. Bei dieser Dicke wären sie aufgrund des quantenmechanischen Tunneleffekts elektrisch durchlässig. In einem Verbundprojekt der EU wird des-

halb das Wachstum von High-K Oxiden auf Silizium und die Integration dieser Oxide in die CMOS Technologie untersucht. In enger Kooperation mit experimentellen Gruppen werden die Wachstumsprozesse mit ab-initio Molekulardynamiksimulationen untersucht. Die genauen quantenmechanischen Verfahren geben Aufschluss über Reaktionsprozesse, Atomstruktur und elektrische Eigenschaften Grenzfläche zwischen Silizium und High-K Gateoxiden.

Grobstruktursimulationen zur Untersuchung des Energie-Imbalanz-Problems

Bearbeitet von: Siegfried Raasch, IMUK, Universität Hannover

Das vorliegende Projekt ist Teil des Verbundes VERTIKO (VERTikaltransporte von Energie- und Spurenstoffen an Ankerstationen und ihre räumliche/zeitliche Extrapolation unter KOMplexen natürlichen Bedingungen), welches vom BMBF im Rahmen des Atmosphärenforschungsprogramms AFO2000 gefördert wird. Ziel des Verbundes ist die Erlangung eines besseren Verständnisses der Struktur und der Dynamik des Vertikaltransport von Energie im Bereich der lanetaren Grenzschicht über komplexem, heterogenem Gelände. Dabei soll die räumlichen und zeitlichen Variabilität turbulenter Oberflächenflüsse über heterogenen Landschaften quantifiziert werden. Das vorliegende Projekt stellt sich die Frage, inwieweit die an ausgewählten Punkten erhobenen Messdaten repräsentativ für eine weitere Umgebung sind. Es wird untersucht, wie der vertikale turbulente Austausch von einem heterogenen Untergrund modifiziert wird und in welcher Größe der Einfluss horizontaler turbulenter Energieflüsse über heterogenen Landschaften ist. Dazu sollen durch zeitlich dreidimensional hochaufgelöste Simulationen der energietragenden Strukturen der gesamten atmosphärischen Grenzschicht horizontal Divergenzen im turbulenten Strom fühlbarer Wärme erfasst und auch quantifiziert werden. Ergänzt werden diese Simulationen durch die von anderen Teilprojekten erhobenen Messdaten. Zum Einsatz kommen hier das Verfahren der akustischen Tomographie und fluggebundene Messsysteme. Mittels Parameterstudien soll der Einfluss variierender Parameter auf die Grenzschichtentwicklung und insbesondere Energietransporte in der Grenzschicht untersucht werden. Die gefundenen Abhängigkeiten sollen zur Verbesserung der Turbulenzparametrisierung über heterogenen Oberflächen in nicht turbulenzauflösenden Modellen (z.B. Wettervorhersagemodellen) eingesetzt werden.

Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX

Bearbeitet von: Peter Hauschildt, Universität Hamburg

Wir berechnen hoch detaillierte Modelle von Stern- und Planetenatmosphären mit unserem state-of-the-art Programmpaket PHOENIX. Unsere Modelle von extrasolaren Gasplaneten (EGPs) sind weltweit führend und beinhalten nicht nur die Effekte von Staubbildung und Millionen von Moleküllinien auf die Struktur der Planetenatmosphäre sondern auch Effekte wie externe Beleuchtung durch den Elternstern des Planeten. Mit diesen Modellen können wir sowohl beobachtete Spektren analysieren als auch

Vorhersagen machen, die z.B. zu verbesserten Beobachtungs- und Detektionsstrategien für EGPs führen. Des Weiteren wollen wir unsere Modelle von Sternatmosphären, die für praktisch alle vorkommenden Sterntypen gültig sind, weiter verbessern und ausbauen. Dabei werden sowohl detaillierte Analysen also auch Modellgitter verwendet.

Zur Zeit berechnen wir z.B. Modellgitter zur Unterstützung des Instrumentendesigns des GAIA Satelliten, eine ESA Mission die ca. 2010 gestartet werden soll. Zusätzliche Unterprojekte unserer PHOENIX Modelle sind die Simulation von Nova- und Supernova-Atmosphären, die Konstruktion von Opazitäts- und Zustandsgleichungstabellen für allgemeine Verwendung in der Astronomie und Entwicklung neuer Strahlungstransport-Algorithmen für 3D Medien mit relativistischen Geschwindigkeitsfeldern.

Das PHOENIX Team hat sein Hauptquartier in Hamburg und besteht zusätzlich aus internationalen Mitarbeitern in Frankreich (Lyon) und den USA (Oklahoma, Harvard, Arizona). Das Programmpaket besteht aus ca. 500.000 Zeilen Fortran 95, C++ und C Code, ist voll parallelisiert (MPI) und läuft auf IBM pSeries Maschinen sehr effizient.

Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes

Bearbeitet von: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele, HFI, Technische Universität Berlin

Für die Strömung um einen Zylinderstumpf, der auf einer Endscheibe positioniert ist, soll das zeitlich-räumliche Strömungsfeld mit hochauflösenden Verfahren numerisch simuliert werden. Diese Strömungskonfiguration ist ein Referenzfall und Leitexperiment für das DFG-Schwerpunktprogramm „Bildgebende Messverfahren für die Strömungsanalyse“. Die Ergebnisse der Simulationen dienen als Datenbasis und Validierungsgrundlage für die durchzuführenden Experimente zur Strömungsvisualisierung.

Grundlage der Simulation sind die vollständigen strömungsmechanischen Bilanzgleichungen. Da eine Direkte Numerische Simulation (DNS) bei der vorliegenden Reynoldszahl von ca. 200000 selbst auf gegenwärtigen Höchstleistungsrechnern nicht alle zeitlichen und räumlichen Skalen - insbesondere in Wandnähe - auflösen kann, bieten sich die Large-Eddy-Simulation (LES) sowie hybride Verfahren wie die Detached-Eddy-Simulation (DES) an. Die vorliegende Strömungskonfiguration kann mit strukturierten Gittern vernetzt werden. Dies macht eine Unterteilung des Strömungsfeldes in mehrere Blöcke relativ einfach und es lassen sich alle Vorteile ausnutzen, die sowohl Lösungsalgorithmen auf strukturierten Gittern als auch das Domain-Decomposition für massiv parallele Rechner bieten.

4.2 Fachberatung

Das Konzept der Fachberatung für die vom Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN empfohlenen Projekte hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird fortgeführt. Jedem vom Wissenschaftlichen Ausschuss empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des HLRN zugeordnet. Vom ZIB sind folgende Mitarbeiter beteiligt:

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
Chemie	Dr. Bernd Kallies
Bioinformatik	Dr. Thomas Steinke
Informatik	Thomas Röblitz Florian Schintke
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Wilhelm Vortisch
Massendatenhaltung, Archivierung	Dr. Manfred Stolle

Tabelle 4.2: Fachberater im ZIB

Neben der Hilfestellung beim Antragsverfahren liegen die Hauptaufgaben der Fachberater in der Beratung bei algorithmischen Fragen, die der effizienten Nutzung des Systems dienen. Weiter geben sie Hilfestellung beim Einsatz von Softwarepaketen, bei der Parallelisierung und Optimierung vorhandener Software und in der Datenhaltung und erstellen umfangreiche Dokumentation zur Anwendungssoftware und zur Systembenutzung.

Die Schulung der Nutzer erfolgt durch Vorträge, Workshops und Kolloquien sowie Lehrveranstaltungen (z.B. zur Parallelisierung mit MPI und OpenMP) in Hochschulen. An der Schnittstelle zwischen Nutzern und HLRN-System leisten die Fachberater in Zusammenarbeit mit den Systemadministratoren einen entscheidenden Beitrag zur Optimierung des Systems und zur Akzeptanzsteigerung, indem Erfahrungen und Anforderungen von Nutzern aufgegriffen und in Modifikationen des Systems umgesetzt werden (z.B. Batch-System: Fair Share Scheduling, Job-Klassen).

Um den Empfehlungen des Wissenschaftsrats zum Höchstleistungsrechnen zu thematischen Verbänden in den Anwendungsfächern nachzukommen, werden im Rahmen von Workshops Nutzergruppen zusammengeführt, die an ähnlichen Fragestellungen oder mit gleichen Programmpaketen arbeiten. So wurde z.B. in 2003 ein Workshop zum Thema "Quantenchemie/Dichtefunktionaltheorie" vom HLRN in Berlin durchgeführt. Die Fachberater sind darüber hinaus über Gruppen ihres jeweiligen Fachgebiets in die Forschung eingebunden.

Die numerische und algorithmische Unterstützung der Projekte kann so gezielt verbessert werden. Gleichzeitig wird damit die Aus- und Weiterbildung auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens und der effizienten Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern gefördert.

Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung der Projekte. Das ZIB koordiniert, unterstützt insbesondere durch das RRZN in Hannover, den HLRN-Support und führt regelmäßige Treffen zur gegenseitigen Information und Ausbildung der norddeutschen Fachberater durch.

Schwerpunkte bei der Organisation des über die sechs beteiligten Länder verteilten, dezentralen HLRN-Supports waren im Berichtsjahr

- die Bereitstellung der technischen Infrastruktur und Nutzung elektronischer Kommunikationsmittel wie z.B. ein web- und datenbank-basiertes Trouble-Ticket-System, welches sehr hilfreich insbesondere bei der Überwindung der Startschwierigkeiten auf dem IBM-System war,
- der Aufbau eines Dokumentationssystems einschließlich der notwendigen Webserver sowie
- ein System zur Erzeugung und Publikation von Nachrichten und Ankündigungen für die Benutzer.

Die auf dem IBM-System implementierten, vom Cray-System übernommenen, Konzepte für eine stabile Benutzerumgebung (z.B. Modules-Konzept, Software-Distribution) haben sich auch auf dieser Plattform bewährt und wurden weiter verfeinert.

4.2.1 Chemie und Bioinformatik

Die im Rahmen des HLRN am ZIB angesiedelte Fachberatung für den Bereich Chemie und Bioinformatik umfasst die Betreuung von Großprojekten aus den Ländern Berlin, Mecklenburg-Vorpommern und Schleswig-Holstein. Vom Fachberater begleitete Großprojekte aus diesen Ländern hatten im Berichtszeitraum einen Anteil von 25 % an der vom HLRN insgesamt an Großprojekte abgegebenen Rechenzeit. Der Anteil aller Chemie-Großprojekte im HLRN betrug 30 %. Damit liegt die Nutzung von Hochleistungsrechnern durch den Bereich Chemie im Rahmen der bisherigen Erfahrungen des ZIB, wobei eine Dominanz der HLRN-Nutzung durch Projekte aus dem Berliner Raum festzustellen ist.

Seit Inbetriebnahme des IBM p690-Clusters des HLRN ist eine Verschiebung des Nutzungsprofils durch Chemieprojekte gegenüber der Anfang des Jahres 2004 außer Betrieb gesetzten Cray T3E und der bereits am 01.08.2002 außer Betrieb genommenen Cray J90 des ZIB festzustellen. Tendenziell werden mehr Probleme mit sehr großen

Speicheranforderungen, aber nur moderaten Anforderungen an eine Parallelverarbeitung bearbeitet. Damit einher geht die zunehmende Präsenz von ursprünglich im Bereich Physik angesiedelten Nutzerkreisen, die aufgrund ihrer fachlichen Fragestellungen von der Fachberatung des Bereichs Chemie betreut werden.

Die Aktivitäten des Fachberaters im Berichtszeitraum erstreckten sich vorrangig auf die Portierung von Paketsoftware aus dem Bereich Chemie auf die IBM p690-Plattform. Die vom HLRN bereitgestellte Chemiesoftware (Pakete *Gaussian*, *MOLPRO*, *TURBOMOLE*, *NWChem*, *CPMD*, *NAMD*) wird ausschließlich durch die Fachberatung am ZIB gepflegt. Portierungsarbeiten erstreckten sich zum einen auf die Umsetzung von Nutzerwünschen bezüglich der Parallelisierung von Codeteilen (*TURBOMOLE*), zum anderen auf Maßnahmen zur Verbesserung der Leistung und des Kommunikations- und I/O-Verhaltens durch die Anpassung von entsprechenden Bibliotheken (numerische Bibliotheken, *Global Arrays*), die mittelbar Bestandteil der jeweiligen Pakete sind. Der Fachberater ist außerdem Autor des Dokumentationssystems des HLRN.

4.2.2 Geowissenschaften

Das Fachgebiet Geowissenschaften umfasst die Projekte aus dem Bereich Umweltwissenschaften einschließlich dessen Randgebieten Meteorologie, Klimaforschung, Atmosphärenforschung und Meereskunde.

Typische Anwendungen aus dem Bereich der norddeutschen Küstenländer sind mit weiteren großen Projekten auf den HLRN-Rechner gekommen. Besonders erwähnenswert sind dabei die stark auf dem HLRN vertretene Gruppe vom Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover. Weitere große Projekte kommen vom Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock und von der Universität Bremen.

Die Betreuung dieser Projekte haben weitgehend die Fachberaterkollegen an den anderen am HLRN beteiligten Zentren übernommen.

4.2.3 Ingenieurwissenschaften

Die Nutzung der verfügbaren Rechnerressourcen des ZIB (Cray T3E, IBM p690) durch Großprojekte aus dem ingenieurwissenschaftlichen Bereich ist insgesamt zurückgegangen.

Wichtige Arbeitsgruppen, die in der Vergangenheit das System CRAY nutzten, haben mit dem Umstieg auf den HLRN-Rechner gezögert, da auf dem Zielsystem gute und vor allem stabile Produktionsbedingungen für eine zügige Portierung der Codes und Projekte zunächst noch nicht gegeben waren. Massiv-parallele Anwendungen mit ihren für CFD-Codes oft typischen feingranularen Kommunikationsmustern werden solange auf dem System CRAY T3E effizienter bedient, bis das HLRN-System mit

der endgültigen Netzwerkkonfiguration ausgestattet ist (Spätsommer 2004, das System CRAY T3E wurde allerdings Anfang 2004 stillgelegt). Außerdem setzten einige der Projekte weiter und verstärkt auf eigene PC-Cluster. Erst der im 4. Quartal 2003 abgeschlossene I/O-Umbau der HLRN-Komplexe und der damit verbundene deutlich stabilere Betrieb hat den HLRN für ingenieurwissenschaftliche Projekte wieder interessant gemacht. Dies macht sich durch einen jetzt stetig wachsenden Anteil an abgenommener Rechenzeit durch dieses Fachgebiet bemerkbar.

Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) arbeiten größtenteils mit selbstgeschriebenen Forschungs-codes, es kommen aber auch kommerzielle Pakete wie *Fluent* und *StarCD* zum Einsatz. Beide Pakete sind auf dem HLRN verfügbar.

Viele Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich arbeiten mit kommerziellen Paketen wie *ABAQUS* und *ANSYS*, die für die typischen Problemgrößen eine gute Performance auf dem HLRN-Rechner zeigen. Die Nutzung von *ABAQUS* hat auch in diesem Berichtszeitraum weiter zugenommen und es kommt trotz der deutlich verbesserten Leistung immer wieder zu Engpässen bei der Anzahl der verfügbaren Lizenzen, da vermehrt größere Prozessoranzahlen für einzelne Rechnungen verwendet werden.

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater eng mit der Arbeitsgruppe von Prof. Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin (HFI)) auf dem Gebiet *Computational Fluid Dynamics* mit dem Schwerpunkt Modellierung und Berechnung der Austauschvorgänge in Mehrphasen-/Mehrkomponentenströmungen (Wärme, Stoff, Impuls, Turbulenz) zusammen. Er ist außerdem Mitglied des universitären Forschungsschwerpunkts *Fluidsystemtechnik*³ und Teilprojektleiter im DFG-Graduiertenkolleg 827 *Transportvorgänge an bewegten Phasengrenzflächen*⁴, die beide an der TUB angesiedelt sind.

Im Ausbildungsbereich werden Kurse (MPI/OpenMP-Kurs, auch im Bereich des HLRN) und Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel Computing*) vom Fachberater durchgeführt.

4.2.4 Physik

Auf dem HLRN-Rechner haben die Physikprojekte aus der Gruppe der Berliner Großprojekte im Berichtszeitraum mit 32% den größten Anteil der Rechenzeit unter den vertretenen Fachgebieten abgenommen. Der neue Rechner ist mithin von den Physikern sehr gut angenommen worden.

Ein Schwerpunkt der Tätigkeit des Fachberaters Physik war auch in diesem Jahr die Mitarbeit im Telekommunikationsprojekt MOMENTUM (siehe Seite 93) der Abteilung Optimierung. In dem Projekt ist ein umfangreiches parallelisiertes Programm zur

³<http://www.tu-berlin.de/fst/>

⁴<http://www.tu-berlin.de/fst/grk827/>

Simulation von UMTS-Netzwerken entwickelt worden. Die Beiträge des Fachberaters sind die Spezifizierung der Parallelisierung, deren Implementierung, die Durchführung erster realistisch großer Simulationen sowie Präsentationen zur Parallelisierung der Software auf einschlägigen Konferenzen.

Auf dem Gebiet der Ausbildung führte der Fachberater gemeinsam mit Wolfgang Baumann einen Blockkurs „Einführung in die Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ durch.

Gitterfeldtheorie

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Volkard Linke (Freie Universität Berlin), Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin), Gerrit Schierholz (DESY Zeuthen)

Das wissenschaftliche Arbeitsgebiet des Fachberaters Physik ist die Gitterfeldtheorie. In diesem Gebiet werden Untersuchungen zur Theorie der Elementarteilchen mit Hilfe von Computersimulationen durchgeführt. Derartige Untersuchungen gehören zu den Grand Challenges des Supercomputings.

Im Berichtsjahr wurden algorithmische Verbesserungen im Produktionsprogramm der QCDSF-Collaboration (DESY Zeuthen, FU Berlin, HU Berlin, ZIB u.a.) implementiert, wodurch die Ausführungszeit von Produktionsläufen etwa um einen Faktor vier verkürzt werden konnte. Als Beitrag zu den Arbeiten der Gruppe Müller-Preußker wurde ein parallelisiertes Programm zur Simulation der reinen SU(2)-Eichtheorie geschrieben.

4.3 Weitverkehrsnetze

4.3.1 Virtueller Supercomputer Berlin - Hannover

Bearbeitet von: Hubert Busch, Sebastian Heidl, Matthias Heyder, Thomas Röblitz

Kooperationspartner: RRZN, IBM Deutschland GmbH

Förderung: DFN-Verein

Eine wichtige Komponente des in Berlin und Hannover verteilt betriebenen HLRN-Systems (vgl. Kapitel 4.1.1) ist die dediziert genutzte Datenleitung zwischen den beiden Standorten ZIB und RRZN. Technisch handelt es sich bei dieser Verbindung um einen vom DFN-Verein gemieteten und von der Deutschen Telekom bereitgestellten „transparenten WDM-Kanal“ im G-WiN mit einer Übertragungsbandbreite von maximal 2,4 Gbit/s, der mit dem Gigabit-Ethernet-Protokoll mit 1 Gbit/s genutzt wird.

Sämtliche Knoten des HLRN-Systems einschließlich der Vorrechner (s. Abbildung 4.5) bilden über diese Verbindung ein gemeinsames IP-Subnetz.

Im Rahmen einer Kooperation mit dem RRZN, dem DFN-Verein und der Firma IBM wurden im Berichtszeitraum Untersuchungen über

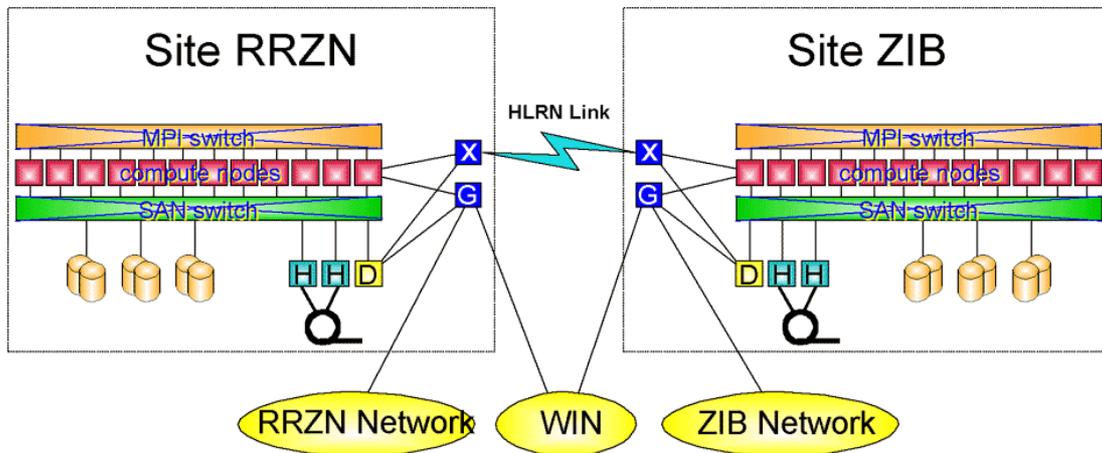


ABBILDUNG 4.5: Einbindung des HLRN-Links in das HLRN-Gesamtsystem

- die quantitative und qualitative Nutzung des HLRN-Links,
- effektive Dateioperationen über den HLRN-Link,
- die Kopplung von parallelen Programmen und
- ein gemeinsames Ressourcen-Management-System

durchgeführt. Erste Ergebnisse sind bereits dem allgemeinen Benutzerbetrieb des HLRN-Systems zu Gute gekommen.

Die Round-Trip-Zeiten für den Transfer von kurzen IP-Paketen für die zweimal 300 km liegen bei etwa 4,5 Millisekunden. Um große Datenmengen effektiv über diese Verbindung zu transportieren, ist die Standard-Paketgröße des Ethernet-Protokolls mit 1518 Byte zu klein, beim HLRN-Link werden daher sogenannte Jumbo-Frames übertragen, die Paketgröße beträgt 9018 Byte. Die gemessenen Transferraten einzelner Anwendungen steigen um den Faktor drei bis acht.

Für den Anwender ist nun entscheidend, ob die jeweilige Anwendung auch die Vorteile der großen Paketgrößen nutzen kann. Standard-Kommandos (z.B. cp für Dateitransfer über NFS) oder Message-Passing (mpi über poe) nutzen die Jumbo-Frames nicht, die erzielten Datenraten liegen unter bzw. um 10 MByte/s. Spezielle Programme für Dateitransfer (z.B. das vom ZIB entwickelte dmcp) erreichen durch Nutzen der großen Paketgrößen Datenraten von ca. 20 MByte/s, spezielle Programme für Message-Passing (z.B. mpich) erreichen ca. 95 MB/s.

Die lokal in Berlin und Hannover verfügbaren Heimat-Dateiverzeichnisse (/home) werden derzeit nur mittels NFS über den HLRN-Link der anderen Seite zur Verfügung gestellt, diese Methode hat sich für kleinere Dateien als ausreichend erwiesen.

Große Dateien der Dateisysteme /fastfs/work und /perm – hier werden Dateien regelmäßig lokal auf Magnetbänder des automatischen Magnetbandarchivs ausgelagert – können vom Benutzer selbst mit den oben genannten dmshp-Routinen effektiv zum jeweils anderen Standort übertragen werden.

Ein kleineres über beide Teilkomplexe verteiltes Beispiel der den TOP500-Listen zu Grunde liegenden Anwendung „LINPACK“ hat bereits gezeigt, dass parallele Anwendungen über den HLRN-Link hinweg gerechnet werden können (Multi-Side-Jobs). Die Leistung der verteilten Rechnung (je acht Rechenknoten bzw. je 256 Prozessoren) lag nur um 18% unterhalb der Leistung der Rechnung mit 16 Rechenknoten (512 Prozessoren) auf einem Teilkomplex. Reale Anwendungen, wie zum Beispiel gekoppelte Systeme, können so auf die Knoten des HLRN-Systems verteilt werden, dass kommunikationsintensive Operationen jeweils auf einem Teilkomplex, Operationen mit geringerem Kommunikationsbedarf über den HLRN-Link bearbeitet werden. Hier wird ein geringerer Leistungsabfall erwartet. Das Ressourcen-Management-System des HLRN-Rechners (LoadLeveler) verfügt derzeit noch nicht über geeignete Hilfsmittel zur Reservierung von Rechenknoten über Komplexgrenzen hinweg.

Eine wesentliche Komponente des in Berlin und Hannover gemeinsam betriebenen HLRN-Systems ist das gemeinsame Ressourcen-Management-System LoadLeveler. Ziel der gemeinsamen Arbeit mit der Fa. IBM ist hier, dass das System entweder den Job explizit auf dem vom Benutzer ausgewählten Teilkomplex oder - falls vom Benutzer gewünscht - auf dem zur Ausführungszeit geeigneteren Teilkomplex ausführt. Weiterhin wird das Ressourcen-Management-System derart erweitert, dass auch Multi-Side-Jobs mit vorgegebenen Anzahlen von Knoten auf dem Gesamtsystem wie vom Benutzer gewünscht ausgeführt werden.

4.3.2 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger, Marek Fröhlich

Kooperationspartner: Rechenzentren der Freien Universität Berlin, der Humboldt-Universität zu Berlin, der Technischen Universität Berlin

Förderung: DFN-Verein

Das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN (Berlin Research Area Information Network) ist das Berliner Daten- und Kommunikationsnetz für die Wissenschaft. BRAIN ist der Bestandteil des Berliner Landesnetzes, den das Land Berlin aufgrund eines Beschlusses des Senats von Berlin und einer entsprechenden Verwaltungsvereinbarung grundsätzlich allen aus öffentlichen Mitteln geförderten Forschungs- und Wissenschaftseinrichtungen im Land Berlin und sonstigen Einrichtungen, an denen das Land Berlin finanziell beteiligt ist, als Hochgeschwindigkeitsdatennetz zur Verfügung gestellt hat.

Kabelnetz

Das Kabelnetz von BRAIN verbindet wissenschaftliche und kulturelle Einrichtungen in der Stadt. Von der Funktion her gesehen ist BRAIN ein selbständiges Netz;

das physikalische Leitungsnetz ist jedoch ein Teil des vom Landesbetrieb für Informationstechnik (LIT) betriebenen Berliner MAN (Metropolitan Area Network), dem Lichtwellenleiter-Netz (LWL-Netz) der Berliner Verwaltung. Auf den Kabelstrecken des Kernnetzes und auf einigen weiteren Stich- und Verbindungsstrecken des MAN ist ein Kontingent von insgesamt 2000 km Faserstrecke für BRAIN reserviert.

Durch den Anschluss neuer Standorte konnte das Kabelnetz im Berichtsjahr um mehr als 35 km erweitert werden. Neu angeschlossen wurden:

- zwei Nebenstandorte des Deutschen Historischen Museums
- ein weiterer Nebenstandort der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft FHTW
- zwei Standorte der Universität der Künste
- ein weiterer Standort der Stiftung Preußischer Kulturbesitz in Dahlem

Insgesamt werden zur Zeit 74 Standorte durch BRAIN-Lichtwellenleiter (teilweise in Verbindung mit internen Leitungen der Universitäten) erschlossen.

Dienste

Auf dem von BRAIN selbständig verwalteten Glasfasernetz haben sich im Laufe der Jahre einige zusätzliche Dienste, für die in der Region ein besonderer Bedarf besteht, etablieren können:

- Betrieb des regionalen G-WiN mit zusätzlichen Komponenten (ringförmiger Backbone zur Erhöhung der Sicherheit) in Zusammenarbeit mit dem DFN-Verein
- Betrieb eines lokalen Netzes mit ATM-Technik
- Betrieb eines lokalen Netzes mit Gigabit-Ethernet-Technik und zentralem Netzwerkmanagement
- Bereitstellung von Glasfasern zur internen Vernetzung verstreuter Standorte einzelner Einrichtungen
- Bereitstellung eines Zugangs zum Berliner Landesnetz über eine Direktverbindung zum LIT; dieser Zugang zum Intranet des Landes Berlin erlaubt den Verwaltungen der wissenschaftlichen Einrichtungen, direkt auf die Formularserver im Landesnetz zuzugreifen.

Seit dem 01.07.2003 werden alle von BRAIN angebotenen Dienste in einem Standardvertrag zusammengefasst. Über die Nutzung eines oder mehrerer dieser Dienste wurden mit 28 Einrichtungen entsprechende Vereinbarungen geschlossen.

Aufbau des Berliner Gigabit-Ethernet-Verbundes

BRAIN bietet den wissenschaftlichen Einrichtungen neben dem Anschluss an das G-WiN (G-WiN-Datenverkehr über BRAIN-Leitungen) die Möglichkeit, den lokalen Datenverkehr der in Berlin verteilten Standorte über BRAIN-LWL zu transportieren.

Im November 2003 wurden die vorhandenen 4 BRAIN-Netzknoten, welche verschiedenen Einrichtungen gehören und teilweise für BRAIN genutzt wurden, durch acht einheitliche Geräte vom Typ RS8000 der Firma Riverstone-Networks ersetzt. Die Beschaffung der Geräte erfolgte im Rahmen einer EU-weiten Ausschreibung. Der neue Backbone des BRAIN-Verbundnetzes ist ringförmig angelegt, verbindet die acht in Berlin verteilten Netzknoten (siehe Abbildung 4.6) über Gigabit-Ethernet miteinander und wird zentral gemanagt. Die Ringstruktur sowie zusätzliche Querverbindungen sor-

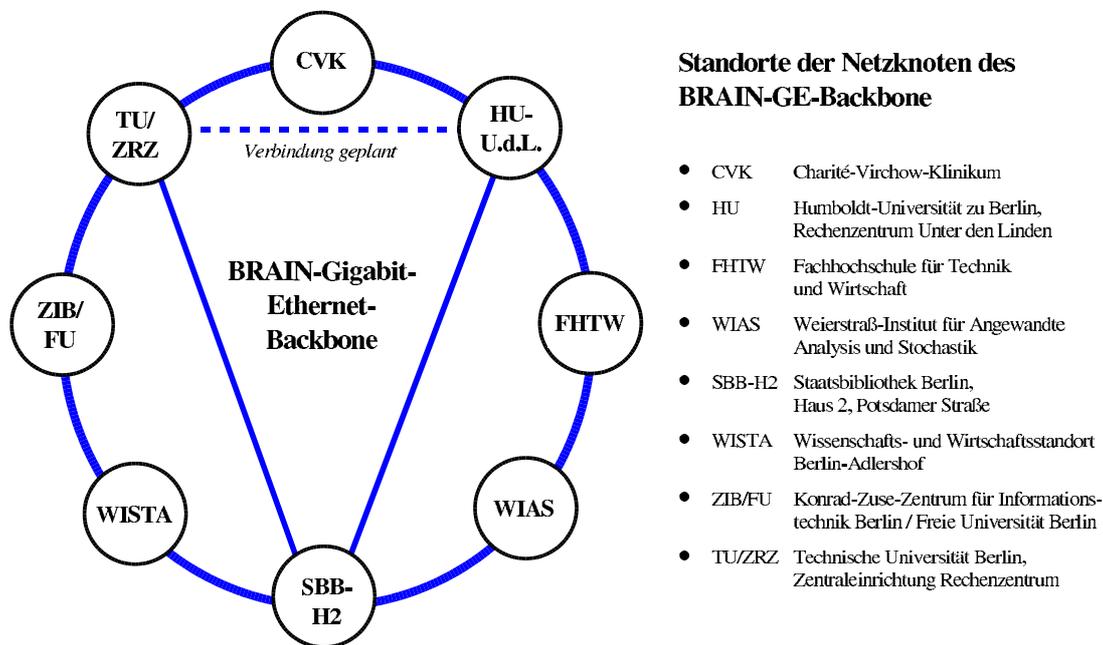


ABBILDUNG 4.6: BRAIN-Gigabit-Ethernet-Backbone

gen für Redundanz in der Leitungsstruktur. Dadurch sind Unterbrechungen einzelner Backbone-Verbindungen (z.B. durch Leitungsschaden) für den Nutzer nicht spürbar.

Als Transportprotokoll im Backbone wird MPLS (Multi-Protokoll-Label-Switching) eingesetzt. Der Transport von Paketen erfolgt bei MPLS (RFC 3031, RFC 3032) über zuvor festgelegte Pfade zwischen den Endpunkten. Jedes Paket wird dazu mit einem eigenen Label versehen, welches u.a. den Pfad, den das Paket durch den Backbone nimmt, bestimmt. Die Verwendung von MPLS als Transportprotokoll ermöglicht den Einsatz von Ressource-Reservation-Protokoll und Traffic Engineering (RSVP-TE, RFC 3209). Mit RSVP-TE lassen sich Verkehrsströme über festgelegte Stationen im Backbone lenken - so können Knoten mit hohem Verkehrsaufkommen gezielt

umgangen und Engpässe vermieden werden. Dies ist mit reinem IPv4 nur bedingt unter Verwendung von SDRP⁵ möglich. Durch RSVP lassen sich die von ATM bekannten Quality-of-Service-(QoS)-Eigenschaften auch für die angebotenen Dienste im Backbone nutzen - sei es für permanente Verbindungen zwischen zwei oder mehreren Standorten oder für temporär geschaltete Verbindungen. Für jede Verbindung kann eine Reihe von Qualitätsmerkmalen definiert und für die Dauer der Verbindung garantiert werden.

Im Rahmen ihrer Anbindung wird für jede Einrichtung ein eigenes Layer2-VPN (Virtual-Private-Network) aufgespannt. Ein Layer2-VPN separiert die Datenströme der Einrichtungen auf der untersten Protokollebene. Für die jeweilige Einrichtung steht scheinbar eine eigene LWL zur Verfügung - dies ermöglicht den Transport beliebiger Protokolle (Ethernet, IP, IPX, etc.) der Einrichtungen über den Backbone. Die Verbindungen werden von den jeweiligen Einrichtungen selbst betreut. Der Anschluss an den Backbone erfolgt wahlweise über 100 Mbit/s oder 1000 Mbit/s Fiber-Ports pro Einrichtungsstandort.

Die einzelnen Verbindungen einer Einrichtung über den Backbone werden über Backup-Tunnel zusätzlich gesichert. Bei einer Leitungsstörung im Backbone werden die bestehenden Verbindungen in ca. 50-100 ms auf die Backup-Tunnel geschwenkt (Fast-ReRoute) - die laufenden Anwendungen der Einrichtung werden nicht unterbrochen.

Zum 31.12.2003 konnten insgesamt 22 Standorte der folgenden Einrichtungen an den Gigabit-Ethernet-Backbone angeschlossen werden: Freie Universität Berlin, Technische Universität Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Stiftung Preussischer Kulturbesitz, Universität der Künste, Deutsches Historisches Museum, Technische Fachhochschule.

Ausblick

Im Jahr 2004 werden weitere Standorte der o.g. Einrichtungen sowie weitere Einrichtungen an den BRAIN-GE-Backbone angeschlossen.

Laufzeittests im Backbone sollen ergeben, ob die Qualitätsmerkmale von RSVP-TE auch den Anforderungen für die Übertragung zeitkritischer Anwendungen wie Telefonie (Voice over IP) und Video genügen.

Es wird zusätzlich eine Backup-Funktionalität für den G-WiN-Zugang der BRAIN-Teilnehmer angestrebt. Bei einer Störung des G-WiN-Zugangs wird der G-WiN-Verkehr der betroffenen Einrichtung über den BRAIN-Backbone zum nächsten DFN-Peering-Point geleitet, bis die Störung behoben ist. Damit wird auch die Internet-Anbindung der BRAIN-Teilnehmer ausfallsicherer als bisher.

Weitere Informationen zu BRAIN unter <http://www.brain.de>.

⁵SDR - Source Demand Routing, RFC 1940

PUBLIKATIONEN

Die Veröffentlichungen sind abrufbar über

<http://www.zib.de/bib/pub>

und/oder

<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications>

5.1 Preprints

Report 03–01. Arnaud Pêcher; Annegret Wagler. *On Non-Rank Facets of Stable Set Polytopes of Webs with Clique Number Four.*

Abstract: Graphs with circular symmetry, called webs, are relevant w.r.t. describing the stable set polytopes of two larger graph classes, quasi-line graphs and claw-free graphs.

Providing a decent linear description of the stable set polytopes of claw-free graphs is a long-standing problem. However, even the problem of finding all facets of stable set polytopes of webs is open. So far, it is only known that stable set polytopes of webs with clique number ≤ 3 have rank facets only while there are examples with clique number > 4 having non-rank facets.

Report 03–02. Oliver Sander; Rolf Krause. *Automatic Construction of Boundary Parametrizations for Geometric Multigrid Solvers.*

Abstract: We present an algorithm that constructs parametrizations of boundary and interface surfaces automatically. Starting with high-resolution triangulated surfaces describing the computational domains, we iteratively simplify the surfaces yielding a coarse approximation of the boundaries with the same topological type. While simplifying we construct a function that is defined on the coarse surface and whose image is the original surface. This function allows access to the correct shape and surface normals of the original surface as well as to any kind of data defined on it. Such information can be used by geometric multigrid solvers doing adaptive mesh refinement. Our algorithm runs stable on all types of input surfaces, including those that describe domains consisting of several ma-

terials. We have used our method with success in different fields and we discuss examples from structural mechanics and biomechanics.

Report 03–03. Ralf Borndörfer. *Combinatorial Packing Problems.*

Abstract: This article investigates a certain class of combinatorial packing problems and some polyhedral relations between such problems and the set packing problem.

Report 03–04. Marcus Weber. *Improved Perron Cluster Analysis.*

Abstract: The problem of clustering data can often be transformed into the problem of finding a hidden block diagonal structure in a stochastic matrix. Deuffhard et al. have proposed an algorithm that states the number k of clusters and uses the sign structure of k eigenvectors of the stochastic matrix to solve the cluster problem.

Recently Weber and Galliat discovered that this system of eigenvectors can easily be transformed into a system of k membership functions or soft characteristic functions describing the clusters.

In this article we explain the corresponding cluster algorithm and point out the underlying theory. By means of numerical examples we explain how the grade of membership can be interpreted.

Report 03–05. Thorsten Koch. *The final NETLIB-LP results.*

Appeared in: *Operation Research Letters* 32 (2004) 138-142

Abstract: The NETLIB has now served for 18 years as a repository of LP problem instances. From the beginning to the present day there was some uncertainty about the precise values of the optimal solutions. We implemented a program using exact rational arithmetic to compute proofs for the feasibility and optimality of an LP solution.

This paper reports the *exact* optimal objective values for all NETLIB problems.

Report 03–06. Felix Hupfeld. *Hierarchical Structures in Attribute-based Namespaces and their Application to Browsing.*

Abstract: While attribute-value pairs are a popular method to name objects, information retrieval from those attribute-based namespaces is not an easy task. The user has to recall correct attribute names and values and master the syntax and semantics of query formulation. This paper describes hierarchical structures in attribute-based namespaces, shows how to extract them efficiently and evaluates the quality of these structures in an user experiment. It proposes an user interface for browsing attribute-named object sets which makes this task resemble today's file-system browsers and compares the usability of this interface to normal form-based methods in an user study.

Report 03–07. Christiane Helling; Rupert Klein; Peter Voitke; Erwin Sedlmayr. *Dust formation in brown dwarf atmospheres under conditions of driven turbulence.*

Abstract: Based on the knowledge gained from direct numerical simulations which are only possible in the microscale regime, a concept of driven turbu-

lence is presented which allows to enter the mesoscopic scale regime. Here, dust formation under stochastic hydro- and thermodynamic conditions is studied: constructively superimposed stochastic waves initiate dust formation by the creation of singular nucleation events. It, hence, results a varying mean grain size and dust density in space and time. The newly formed dust changes the thermodynamic behavior from almost isotherm to adiabatic and chemically depletes the gas phase.

Report 03–08. Reinhard Hochmuth; Peter Deuffhard. *Multiscale Analysis for the Bio-Heat Transfer Equation*.

Abstract: The bio-heat transfer equation is a macroscopic model for describing the heat transfer in microvascular tissue. In [Deuffhard, Hochmuth 2002] the authors applied homogenization techniques to derive the bio-heat transfer equation as asymptotic result of boundary value problems which provide a microscopic description for microvascular tissue. Here those results are generalized to a geometrical setting where the regions of blood are allowed to be connected. Moreover, asymptotic corrector results are derived.

Report 03–09. Sebastian Orlowski; Roland Wessälly. *Comparing Restoration Concepts using Optimal Network Configurations with Integrated Hardware and Routing Decisions*.

Erschienen in: Proceedings of the Fourth International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks (DRCN 2003), Banff, Alberta, Canada, pp.15-22

Abstract: We investigate the impact of link and path restoration on the cost of telecommunication networks. The surprising result is the following: the cost of an optimal network configuration is almost independent of the restoration concept if (i) the installation of network elements (ADMs, DXCs, or routers) and interface cards, (ii) link capacities, and (iii) working and restoration routings are simultaneously optimized.

We present a mixed-integer programming model which integrates all these decisions. Using a branch-and-cut algorithm (with column generation to deal with all potential routing paths), we solve structurally different real-world problem instances and show that the cost of optimal solutions is almost independent of the used restoration concept.

In addition, we optimize spare capacities for given shortest working paths which are predetermined with respect to different link metrics. In comparison to simultaneous optimization of working and restoration routings, it turns out that this approach does not allow to obtain predictably good results.

Report 03–10. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka. *Polyhedral Investigations on Stable Multi-Sets*.

Abstract: Stable multi-sets are an evident generalization of the well-known stable sets. As integer programs, they constitute a general structure which allows for a wide applicability of the results. Moreover, the study of stable multi-sets

provides new insights to well-known properties of stable sets. In this paper, we continue our investigations started in [Koster and Zymolka 2002] and present results of three types: on the relation to other combinatorial problems, on the polyhedral structure of the stable multi-set polytope, and on the computational impact of the polyhedral results.

First of all, we embed stable multi-sets in a framework of generalized set packing problems and point out several relations. The second part discusses properties of the stable multi-set polytope. We show that the vertices of the linear relaxation are half integer and have a special structure. Moreover, we strengthen the conditions for cycle inequalities to be facet defining, show that the separation problem for these inequalities is polynomial time solvable, and discuss the impact of chords in cycles. The last result allows to interpret cliques as cycles with many chords.

The paper is completed with a computational study to the practical importance of the cycle inequalities. The computations show that the performance of state-of-the-art integer programming solvers can be improved significantly by including these inequalities.

Report 03–11. Peter Woitke; Christiane Helling. *Formation and structure of quasi-static cloud-layers in brown dwarf atmospheres.*

Abstract: In this paper, first solutions of the dust moment equations developed in [Woitke & Helling 2002] for the description of dust formation and precipitation in brown dwarf and giant gas planet atmospheres are presented. We consider the special case of a static brown dwarf atmosphere, where dust particles continuously nucleate from the gas phase, grow by the accretion of molecules, settle gravitationally and re-evaporate thermally. Applying a kinetic description of the relevant microphysical and chemical processes for TiO_2 -grains, the model makes predictions about the large-scale stratification of dust in the atmosphere, the depletion of molecules from the gas phase, the supersaturation of the gas in the atmosphere as well as the mean size and the mass fraction of dust grains as function of depth. Our results suggest that the nucleation occurs in the upper atmosphere where the gas is cool, strongly depleted, but nevertheless highly supersaturated ($S \gg 1$). These particles settle gravitationally and populate the warmer layers below, where the in-situ formation (nucleation) is ineffective or even not possible. During their descent, the particles grow up to radii $\approx 0.3 \mu\text{m} \dots 150 \mu\text{m}$, depending on gas conditions around the cloud base. The particles finally sink into layers which are sufficiently hot to cause their thermal evaporation. Hence, an effective transport mechanism for condensable elements exists considered solid/liquid material. In the stationary case studied here, this downward directed element transport by precipitating dust grains is balanced by an upward directed flux of condensable elements from the deep interior of the star via convective mixing (no dust without mixing). We find a self-regulation mechanism which leads to an approximate phase equilibrium ($S \approx 1$) around the cloud base. The mass fraction of

dust present in the atmosphere results be to approximately given by the mass fraction of condensable elements in the gas being mixed up.

Report 03–12. Amin Coja-Oghlan; Sven O. Krumke; Till Nierhoff. *Average Case Analysis of a Hard Dial-a-Ride Problem.*

An extended abstract appeared in: Proc. of the 6th Workshop on Models and algorithms for Planning and Scheduling Problems. 2003. Pp. 48-50 under the title: Scheduling a server on a caterpillar network - a probabilistic analysis

Abstract: In the dial-a-ride-problem (DARP) objects have to be moved between given sources and destinations in a transportation network by means of a server. The goal is to find a shortest transportation for the server. We study the DARP when the underlying transportation network forms a caterpillar. This special case is strongly NP-hard in the worst case. We prove that in a probabilistic setting there exists a polynomial time algorithm which almost surely finds an optimal solution. Moreover, with high probability the optimality of the solution found can be certified efficiently. We also examine the complexity of the DARP in a semi-random setting and in the unweighted case.

Report 03–13. Martin Weiser; Anton Schiela; Peter Deuffhard. *Asymptotic Mesh Independence of Newton's Method Revisited.*

Abstract: The paper presents a new affine invariant theory on asymptotic mesh independence of Newton's method in nonlinear PDEs. Compared to earlier attempts, the new approach is both much simpler and more natural from the algorithmic point of view. The theory is exemplified at collocation methods for ODE boundary value problems and at finite element methods for elliptic PDE problems.

Report 03–14. Luca Becchetti; Stefano Leonardi; Alberto Marchetti-Spaccamela; Guido Schäfer; Tjark Vredeveld. *Smoothing Helps: A Probabilistic Analysis of the Multi-Level Feedback Algorithm.*

Abstract: In this paper we introduce the notion of smoothed competitive analysis of online algorithms. Smoothed analysis has been proposed by [Spielman and Teng STOC 2001] to explain the behaviour of algorithms that work well in practice while performing very poorly from a worst case analysis point of view. We apply this notion to analyze the Multi-Level Feedback (MLF) algorithm to minimize the total flow time on a sequence of jobs released over time when the processing time of a job is only known at time of completion.

The initial processing times are integers in the range $[1, 2^K]$. We use a partial bit randomization model, where the initial processing times are smoothed by changing the k least significant bits under a quite general class of probability distributions. We show that MLF admits a smoothed competitive ratio of $O(\max((2^k/\sigma)^3, (2^k/\sigma)^2 2^K - k))$, where σ denotes the standard deviation of the distribution. In particular, we obtain a competitive ratio of $O(2^K - k)$ if $\sigma = \Theta(2^k)$. stronger adaptive We also prove an $\Omega(2^{K-k})$ lower bound for any deterministic algorithm that is run on processing times smoothed according

to the partial bit randomization model. For various other smoothing models, including the additive symmetric smoothing model used by [Spielman and Teng], we give a higher lower bound of $\Omega(2^K)$.

A direct consequence of our result is also the first average case analysis of MLF. We show a constant expected ratio of the total flow time of MLF to the optimum under several distributions including the uniform distribution.

Report 03–15. Wolfgang Dalitz; Winfried Neun; Wolfram Sperber. *Semantic Annotation in Mathematics and Math-Net*.

Appeared in: Annotation for the Semantic Web. IOS Press, 2003, pp. 3-22

Abstract: The Web of the future will provide a huge amount of information. We need better ways for dealing with and managing the information. A qualified semantic annotation of the information plays a key role for the Web of the future. This article gives an overview about the efforts of the mathematical community to build up a distributed and open information and communication system for mathematics: the Math-Net. The Math-Net Initiative has developed metadata schemas for some classes of Web resources which are relevant in mathematics. Math-Net Services process this information and enable the user to efficiently search and access the information.

Report 03–16. Ralf Kähler; Hans-Christian Hege. *Visualization of Time-Dependent Adaptive Mesh Refinement Data*.

Abstract: Analysis of phenomena that simultaneously occur on quite different spatial and temporal scales require adaptive, hierarchical schemes to reduce computational and storage demands. For data represented as grid functions, the key are adaptive, hierarchical, time-dependent grids that resolve spatio-temporal details without too much redundancy. Here, so-called AMR grids gain increasing popularity. For visualization and feature identification/tracking, the underlying continuous function has to be faithfully reconstructed by spatial and temporal interpolation. Well designed interpolation methods yield better results and help to reduce the amount of data to be stored.

We address the problem of temporal interpolation of AMR grid data, e.g. for creation of smooth animations or feature tracking. Intermediate grid hierarchies are generated by merging the cells on all refinement levels that are present in the key frames considered. Utilizing a clustering algorithm a structure of nested grids is induced on the resulting collection of cells. The grid functions are mapped to the intermediate hierarchy, thus allowing application of appropriate interpolation techniques.

Report 03–17. Werner Benger; Hans-Christian Hege. *Tensor Splats*.

Abstract: An improved general-purpose technique for the visualization of symmetric positive definite tensor fields of rank two is described.

It is based on a splatting technique that is built from tiny transparent glyph primitives which are capable to incorporate the full directional information content of a tensor.

The result is an information-rich image that allows to read off the preferred directions in a tensor field at each point of a three-dimensional volume or two-dimensional surface. It is useful for analyzing slices or volumes of a three-dimensional tensor field and can be overlaid with standard volume rendering or color mapping.

The application of the rendering technique is demonstrated on general relativistic data and the diffusion tensor field of a human brain.

Report 03–18. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *A sample path relation for the sojourn times in G/G/1-PS systems and its applications.*

Abstract: For the general G/G/1 processor sharing (PS) system a sample path result for the sojourn times in a busy period is proved, which yields a relation between the sojourn times under PS and FCFS discipline. In particular, the result provides a formula for the mean sojourn time in G/D/1-PS in terms of the mean sojourn time in the corresponding G/D/1-FCFS, generalizing known results for GI/M/1 and M/GI/1. Extensions of the formula provide the basis for a two-moment approximation of the mean sojourn time in G/GI/1-PS in terms of a related G/D/1-FCFS.

Report 03–19. Peter Deuffhard; Marcus Weber. *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics.*

Abstract: The key to molecular conformation dynamics is the direct identification of metastable conformations, which are almost invariant sets of molecular dynamical systems. Once some reversible Markov operator has been discretized, a generalized symmetric stochastic matrix arises. This matrix can be treated by Perron cluster analysis, a rather recent method involving a Perron cluster eigenproblem. The paper presents an improved Perron cluster analysis algorithm, which is more robust than earlier suggestions. Numerical examples are included.

Report 03–20. Peter Deuffhard; Christof Schütte. *Molecular Conformation Dynamics and Computational Drug Design.*

Abstract: The paper surveys recent progress in the mathematical modelling and simulation of essential molecular dynamics. Particular emphasis is put on computational drug design wherein time scales of *msec* up to *min* play the dominant role. Classical long-term molecular dynamics computations, however, would run into ill-conditioned initial value problems already after time spans of only $psec = 10^{-12}sec$. Therefore, in order to obtain results for times of pharmaceutical interest, a combined deterministic-stochastic model is needed.

The concept advocated in this paper is the direct identification of *metastable conformations* together with their life times and their transition patterns. It can be interpreted as a *transfer operator* approach corresponding to some underlying hybrid Monte Carlo process, wherein short-term trajectories enter. Once this operator has been discretized, which is a hard problem of its own, a stochastic matrix arises. This matrix is then treated by *Perron cluster analysis*, a recently developed cluster analysis method involving the numerical solution of an ei-

genproblem for a Perron cluster of eigenvalues. In order to avoid the 'curse of dimension', the construction of appropriate boxes for the spatial discretization of the Markov operator requires careful consideration. As a biomolecular example we present a rather recent SARS protease inhibitor.

Report 03–21. Arnaud Pêcher; Annegret Wagler. *A construction for non-rank facets of stable set polytopes of webs.*

Abstract: Graphs with circular symmetry, called webs, are relevant for describing the stable set polytopes of two larger graph classes, quasi-line graphs [Giles and Trotter 1981, Oriolo 2001] and claw-free graphs [Galluccio and Sassano 1997, Giles and Trotter 1981]. Providing a decent linear description of the stable set polytopes of claw-free graphs is a long-standing problem [Grötschel, Lovász, and Schrijver 1988]. However, even the problem of finding all facets of stable set polytopes of webs is open. So far, it is only known that stable set polytopes of webs with clique number ≤ 3 have rank facets only [Dahl 1999, Trotter 1975] while there are examples with clique number ≥ 4 having non-rank facets [e.g. Liebling et al. 2003, Oriolo 2001, Pêcher and Wagler 2003].

In this paper, we provide a construction for non-rank facets of stable set polytopes of webs. We use this construction to prove, for several fixed values of ω including all odd values at least 5, that there are only finitely many webs with clique number ω whose stable set polytopes admit rank facets only.

Report 03–22. Annegret Wagler. *Critical and Anticritical Edges with respect to Perfectness.*

Abstract: We call an edge e of a perfect graph G critical if $G - e$ is imperfect and call e anticritical if $G + e$ is imperfect. The present paper surveys several questions in this context. We ask in which perfect graphs critical and anticritical edges occur and how to detect such edges. The main result by [Wagler, PhD thesis 2000] shows that a graph does not admit any critical edge if and only if it is Meyniel. The goal is to order the edges resp. non-edges of certain perfect graphs s.t. deleting resp. adding all edges in this order yields a sequence of perfect graphs only. Results of [Hayward 1985] and [Spinrad & Sritharan 1995] show the existence of such edge orders for weakly triangulated graphs; the line-perfect graphs are precisely these graphs where all edge orders are perfect [Wagler 2001]. Such edge orders cannot exist for every subclass of perfect graphs that contains critically resp. anticritically perfect graphs where deleting resp. adding an arbitrary edge yields an imperfect graph. We present several examples and properties of such graphs, discuss constructions and characterizations from [Wagler 1999, Wagler PhD thesis 2000]. An application of the concept of critically and anticritically perfect graphs is a result due to [Hougardy & Wagler 2002] showing that perfectness is an elusive graph property.

Report 03–23. Cornelia Kober; Bodo Erdmann; Robert Sader; Hans-Florian Zeilhofer. *Simulation of the Human Mandible: Comparison of Bone Mineral Density and Stress/Strain Profiles due to Masticatory Muscles' Traction.*

Appeared in: Proceedings of 10th Workshop on the Finite Element Method in Biomedical Engineering, Biomechanics and Related Fields, Ulm, Germany, July 2003 (CD-ROM)

Abstract: The correlation of the inner architecture of bone and its functional loading was already stated by Wolff in 1892. Our objective is to demonstrate this interdependence in the case of the human mandible.

For this purpose, stress/strain profiles occurring at a human lateral bite were simulated. Additionally, by a combination of computer graphics modules, a three-dimensional volumetric visualization of bone mineral density could be given.

Qualitative correspondences between the density profile of the jaw and the simulated stress/strain profiles could be pointed out. In the long run, this might enable the use of the simulation for diagnosis and prognosis.

The solution of the underlying partial differential equations describing linear elastic material behaviour was provided by an adaptive finite element method. Estimates of the discretization errors, local grid refinement, and multilevel techniques guaranteed the reliability and efficiency of the method.

Report 03–24. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka; Monika Jäger; Ralf Hülsermann; Christoph Gerlach. *Demand-wise Shared Protection for Meshed Optical Networks*.

Appeared in: Proceedings of DRCN 2003, the Fourth International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks, October 19-22 (2003) Banff, Canada. Pp. 85-92

Abstract: In this paper, a new shared protection mechanism for meshed optical networks is presented. Significant network design cost reductions can be achieved in comparison to the well-known 1+1 protection scheme. Demand-wise Shared Protection (DSP) bases on the diversification of demand routings and exploits the network connectivity to restrict the number of backup light-paths needed to provide the desired level of protection. Computational experiments approve the benefits of the concept DSP for cost-efficient optical network designs.

Report 03–25. Hartwig Bosse; Martin Grötschel; Martin Henk. *Polynomial Inequalities Representing Polyhedra*.

Abstract: Our main result is that every n -dimensional polytope can be described by at most $(2n - 1)$ polynomial inequalities and, moreover, these polynomials can explicitly be constructed. For an n -dimensional pointed polyhedral cone we prove the bound $2n - 2$ and for arbitrary polyhedra we get a constructible representation by $2n$ polynomial inequalities.

Report 03–26. Maria Fleuren; Hinnerk Stüben; Gideon Zegwaard. *MoDySim - A parallel dynamical UMTS simulator*.

Abstract: UMTS is a 3rd generation mobile telecommunication system which enables multi-service and multi-bit rate communication going beyond the possibilities of previous systems. The simulator MoDySim models UMTS in great

detail. Characteristics of UMTS such as soft hand-over and the interdependency of load and capacity among neighbouring cells are challenges for the parallelisation of such a system. In this paper we explain how the software was parallelised and present performance results of a UMTS simulation for the city of Berlin.

Report 03–27. Ernst-Michael Ilgenfritz; Werner Kerler; Michael Müller-Preussker; André Sternbeck; Hinnerk Stüben. *A numerical reinvestigation of the Aoki phase with $N_f = 2$ Wilson fermions at zero temperature.*

Abstract: We report on a numerical reinvestigation of the Aoki phase in lattice QCD with two flavors of Wilson fermions where the parity-flavor symmetry is spontaneously broken. For this purpose the Hybrid Monte Carlo algorithm was used and an explicit symmetry-breaking source term $h\bar{\psi}i\gamma_5\tau^3\psi$ was added to the Wilson fermion action. The order parameter $\langle\bar{\psi}i\gamma_5\tau^3\psi\rangle$ was studied at several values of (β, κ, h) on lattices of sizes 4^4 to 12^4 . Our largest lattices can be considered as infinitely large allowing to extrapolate to $h = 0$. The existence of a parity-flavor-breaking phase can be confirmed at $\beta = 4.0$ and $\beta = 4.3$ while we find no sign of parity-flavor-breaking at $\beta = 4.6$ and $\beta = 5.0$.

Report 03–28. Frank H. Lutz. *Small Examples of Non-Constructible Simplicial Balls and Spheres.*

Abstract: We construct non-constructible simplicial d -spheres with $d + 10$ vertices and non-constructible, non-realizable simplicial d -balls with $d + 9$ vertices for $d \geq 3$.

Report 03–29. Andreas Bley. *A Lagrangian Approach for Integrated Network Design and Routing in IP Networks.*

Appeared in: Proceedings of International Network Optimization Conference 2003, Oct. 27-29, Evry/Paris, France, pp. 107-113

Abstract: We consider the problem of designing a network that employs a non-bifurcated shortest path routing protocol. The network's nodes and the set of potential links are given together with a set of forecasted end-to-end traffic demands. All relevant hardware components installable at links or nodes are considered. The goal is to simultaneously choose the network's topology, to decide which hardware components to install on which links and nodes, and to find appropriate routing weights such that the overall network cost is minimized.

In this paper, we present a mathematical optimization model for this problem and an algorithmic solution approach based on a Lagrangian relaxation. Computational results achieved with this approach for several real-world network planning problems are reported.

Report 03–30. Arifa Ali Khan; Timur Bakeyev; Meinulf Göckeler; Roger Horsley; Dirk Pleiter; Paul Rakow; Andreas Schäfer; Gerrit Schierholz; Hinnerk Stüben. *Accelerating Hasenbusch's acceleration of Hybrid Monte Carlo.*

Abstract: Hasenbusch has proposed splitting the pseudo-fermionic action into two parts, in order to speed-up Hybrid Monte Carlo simulations of QCD. We

have tested a different splitting, also using clover-improved Wilson fermions. An additional speed-up between 5 and 20% over the original proposal was achieved in production runs.

Report 03–31. Andreas Bley; Arie M.C.A. Koster; Alexander Kröller; Roland Wes-sály; Adrian Zymolka. *Kosten- und Qualitätsoptimierung in Kommunikationsnetzen.*

Erschienen in: Tele-Kommunikation aktuell : TKA Bd. 57 Nr. 7/8 (2003) S. 1-62

Zusammenfassung: Der scharfe Wettbewerb innerhalb der Telekommunikationsbranche zwingt die Netzbetreiber dazu, ihre Investitionen genau zu planen und immer wieder Einsparungsmaßnahmen durchzuführen. Gleichzeitig ist es jedoch wichtig, die Qualität der angebotenen Dienste zu verbessern, um neue Kunden zu gewinnen und langfristig an sich zu binden.

Die mathematische Optimierung bietet sich für viele solcher Aufgabenstellungen als hervorragend geeignetes Planungswerkzeug an. Ziel dieses Artikels ist es, ihre Methodik und ihre Anwendung speziell zur Kosten- und Qualitätsoptimierung in Kommunikationsnetzen vorzustellen. Anhand von vier konkreten Planungsaufgaben aus dem Bereich der Festnetzplanung wird aufgezeigt, wie sich komplexe Zusammenhänge in flexiblen mathematischen Modellen abbilden lassen und welche Verfahren zur automatisierten Bearbeitung der Probleme eingesetzt werden können. Die hier vorgestellten Methoden zeichnen sich insbesondere dadurch aus, dass sie neben hochwertigen Lösungen auch eine Qualitätsgarantie liefern, mit der sich die Lösungen fundiert bewerten lassen. Die dokumentierten Ergebnisse aus verschiedenen Industrieprojekten belegen die Eignung und Güte der mathematischen Optimierung für die Praxis.

Report 03–32. Hans L. Bodlaender; Arie M.C.A. Koster. *Safe separators for treewidth.*

An extended abstract appeared in: Joint Proceedings of the Workshop on Algorithm Engineering and Experiments (ALENEX '04) and the Workshop on Analytic Algorithmics and Combinatorics (ANALCO '04), 2004

Abstract: A set of vertices $S \subseteq V$ is called a safe separator for treewidth, if S is a separator of G , and the treewidth of G equals the maximum of the treewidth over all connected components W of $G - S$ of the graph, obtained by making S a clique in the subgraph of G , induced by $W \cup S$. We show that such safe separators are a very powerful tool for preprocessing graphs when we want to compute their treewidth. We give several sufficient conditions for separators to be safe, allowing such separators, if existing, to be found in polynomial time. In particular, every minimal separator of size one or two is safe, every minimal separator of size three that does not split off a component with only one vertex is safe, and every minimal separator that is an almost clique is safe; an almost clique is a set of vertices W such that there is a $v \in W$ with $W - \{v\}$ a clique. We report on experiments that show significant reductions of instance sizes for graphs from

proba! bilistic networks and frequency assignment.

Report 03–33. Christiane Helling; Rupert Klein; Peter Voitke; Ulrich Nowak; Erwin Sedlmayr. *Dust in Brown Dwarfs IV. Dust formation and driven turbulence on mesoscopic scales.*

Abstract: Dust formation in brown dwarf atmospheres is studied by utilizing a model for driven turbulence in the mesoscopic scale regime. We apply a pseudo-spectral method where waves are created and superimposed within a limited wavenumber interval. The turbulent kinetic energy distribution follows the Kolmogoroff spectrum which is assumed to be the most likely value. Such superimposed, stochastic waves may occur in a convectively active environment. They cause nucleation fronts and nucleation events and thereby initiate the dust formation process which continues until all condensible material is consumed. Small disturbances are found to have a large impact on the dust forming system. An initially dust-hostile region, which may originally be optically thin, becomes optically thick in a patchy way showing considerable variations in the dust properties during the formation process. The dust appears in lanes and curls as a result of the interaction with waves, i.e. turbulence, which form larger and larger structures with time. Aiming on a physical understanding of the variability of brown dwarfs, related to structure formation in substellar atmospheres, we work out first necessary criteria for small-scale closure models to be applied in macroscopic simulations of dust forming astrophysical systems.

Report 03–34. Christiane Helling; Rupert Klein; Erwin Sedlmayr. *The multi-scale dust formation in substellar atmospheres.*

Abstract: Substellar atmospheres are observed to be irregularly variable for which the formation of dust clouds is the most promising candidate explanation. The atmospheric gas is convectively unstable and, last but not least, colliding convective cells are seen as cause for a turbulent fluid field. Since dust formation depends on the local properties of the fluid, turbulence influences the dust formation process and may even allow the dust formation in an initially dust-hostile gas.

A regime-wise investigation of dust forming substellar atmospheric situations reveals that the largest scales are determined by the interplay between gravitational settling and convective replenishment which results in a dust-stratified atmosphere. The regime of small scales is determined by the interaction of turbulent fluctuations. Resulting lane-like and curled dust distributions combine to larger and larger structures. We compile necessary criteria for a subgrid model in the frame of large scale simulations as result of our study on small scale turbulence in dust forming gases.

Report 03–35. Martin Weiser. *Interior Point Methods in Function Space.*

Abstract: A primal-dual interior point method for optimal control problems is considered. The algorithm is directly applied to the infinite dimensional problem. Existence and convergence of the central path are analyzed, and linear

convergence of a short step pathfollowing method is established.

Report 03–36. Frank H. Lutz. *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Geometric 3-Manifolds.*

Abstract: We explicitly construct small triangulations for a number of well-known 3-dimensional manifolds and give a brief outline of some aspects of the underlying theory of 3-manifolds and its historical development.

Report 03–37. Andreas Bley; Adrian Zymolka. *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen.*

Erschienen in: Achstes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik : Energie und Kommunikation Tagungsband 2003

Zusammenfassung: Beim Entwurf und Ausbau von Informations- und Kommunikationsnetzwerken müssen zahlreiche interdependente Entscheidungen getroffen und gleichzeitig mannigfaltige Bedingungen berücksichtigt werden. Die verfügbaren technischen und organisatorischen Alternativmöglichkeiten sind normalerweise so vielfältig und komplex, dass eine manuelle Planung praktisch nicht möglich ist.

In diesem Artikel wird das Potential und die Methodik der mathematischen Optimierung bei der kostenoptimalen Planung von Kommunikationsnetzen vorgestellt.

Als Ausgangspunkt wird exemplarisch eine typische praktische Aufgabe, die Struktur- und Konfigurationsplanung mehrstufiger Telekommunikationsnetzwerke, dargestellt. Anschließend werden kurz die wesentlichen Modellierungstechniken und Verfahrensansätze der mathematischen Optimierung skizziert. Abschließend gehen wir auf die Planung einer adäquaten Informations- und Kommunikations- Infrastruktur für ein dezentrales Energieversorgungsnetz ein.

Report 03–38. Sven Burger; Roland Klose; Achim Schädle; Lin Zschiedrich. *Helm-Pole - A finite element solver for scattering problems on unbounded domains: Implementation based on PML.*

Abstract: The solution of scattering problems described by the Helmholtz equation on unbounded domains is of importance for a wide variety of applications, for example in electromagnetics and acoustics. An implementation of a solver for scattering problems based on the programming language Matlab is introduced. The solver relies on the finite-element-method and on the perfectly-matched-layer-method, which allows for the simulation of scattering problems on complex geometries surrounded by inhomogeneous exterior domains. This report gives a number of detailed examples and can be understood as a user manual to the freely accessible code of the solver HelmPole.

Report 03–39. Javier Marenco; Annegret Wagler. *Chromatic Scheduling Polytopes coming from the Bandwidth Allocation Problem in Point-to-Multipoint Radio Access Systems.*

Abstract: Point-to-Multipoint systems are one kind of radio systems supplying

wireless access to voice/data communication networks. Such systems have to be run using a certain frequency spectrum, which typically causes capacity problems. Hence it is, on the one hand, necessary to reuse frequencies but, on the other hand, no interference must be caused thereby.

This leads to the bandwidth allocation problem, a special case of so-called chromatic scheduling problems. Both problems are NP-hard, and there exist no polynomial time approximation algorithms with a guaranteed quality. One kind of algorithms which turned out to be successful for many other combinatorial optimization problems uses cutting plane methods. In order to apply such methods, knowledge on the associated polytopes is required. The present paper contributes to this issue, exploring basic properties of chromatic scheduling polytopes and several classes of facet-defining inequalities.

Report 03–40. Hans-Christian Hege; Andrei Hutanu; Ralf Kähler; André Merzky; Thomas Radke; Edward Seidel; Brygg Ullmer. *Progressive Retrieval and Hierarchical Visualization of Large Remote Data*.

Abstract: The size of data sets produced on remote supercomputer facilities frequently exceeds the processing capabilities of local visualization workstations. This phenomenon increasingly limits scientists when analyzing results of large-scale scientific simulations. That problem gets even more prominent in scientific collaborations, spanning large virtual organizations, working on common shared sets of data distributed in Grid environments. In the visualization community, this problem is addressed by distributing the visualization pipeline. In particular, early stages of the pipeline are executed on resources closer to the initial (remote) locations of the data sets.

This paper presents an efficient technique for placing the first two stages of the visualization pipeline (data access and data filter) onto remote resources. This is realized by exploiting the “extended retrieve” feature of GridFTP for flexible, high performance access to very large HDF5 files. We reduce the number of network transactions for filtering operations by utilizing a server side data processing plugin, and hence reduce latency overhead compared to GridFTP partial file access. The paper further describes the application of hierarchical rendering techniques on remote uniform data sets, which make use of the remote data filtering stage.

Report 03–41. Andreas Eisenblätter; Armin Fügenschuh; Hans-Florian Geerdes; Daniel Junglas; Thorsten Koch; Alexander Martin. *Optimization Methods for UMTS Radio Network Planning*.

Abstract: The UMTS radio network planning problem poses the challenge of designing a cost-effective network that provides users with sufficient coverage and capacity. We describe an optimization model for this problem that is based on comprehensive planning data of the EU project MOMENTUM. We present heuristic mathematical methods for this realistic model, including computational results.

Report 03–42. Hans-Florian Geerdes; Holger Karl. *The Potential of Relaying in Cellular Networks.*

Appeared in: Proc. of INOC 2003, Evry-Paris, France, (2003) 237-242

Abstract: Relaying is a protocol extension for cellular wireless computer networks; in order to utilize radio resources more efficiently, several hops are allowed within one cell. This paper investigates the principle potential of relaying by casting transmission scheduling as a mathematical optimization problem, namely, a linear program. We analyze the throughput gains showing that, irrespective of the concrete scheduling algorithm, performance gains of up to 30% on average for concrete example networks are achievable.

Report 03–43. Hans-Florian Geerdes. *Assessing Capacity Improvements by Relaying in Cellular Networks.*

Appeared in: Proc. of the Int. Conf. on Operations Research 2003, Heidelberg, Germany

Abstract: Relaying – allowing multiple wireless hops – is a protocol extension for cellular networks conceived to improve data throughput. Its benefits have only been quantified for small example networks. For assessing its general potential, we define a complex resource allocation/scheduling problem. Several mathematical models are presented for this problem; while a time-expanded MIP approach turns out intractable, a sophisticated column generation scheme leads to good computational results. We thereby show that for selected cases relaying can increase data throughput by 30% on the average.

Report 03–44. Lin Zschiedrich; Roland Klose; Achim Schädle; Frank Schmidt. *A new Finite Element realization of the Perfectly Matched Layer Method for Helmholtz scattering problems on polygonal domains in 2D.*

Abstract: In this paper we propose a new finite element realization of the Perfectly Matched Layer method (PML-method). Our approach allows to deal with arbitrary shaped polygonal domains and with certain types of inhomogeneous exterior domains. Among the covered inhomogeneities are open waveguide structures playing an essential role in integrated optics. We give a detailed insight to implementation aspects. Numerical examples show exponential convergence behavior to the exact solution with the thickness of the PML sponge layer.

Report 03–45. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka. *Minimum Converter Wavelength Assignment in All-Optical Networks.*

Appeared in: Proceedings of ONDM 2003, the 8th IFIP Working Conference on Optical Network Design and Modelling, February 2-4, 2004. Gent, Belgium, pp. 517-535.

Abstract: Finding conflict-free wavelength assignments with a minimum number of required conversions for a routing of the lightpaths is one of the important tasks within the design of all-optical networks. We consider this problem in multi-fiber networks with different types of WDM systems. We give a detailed

description of the problem and derive its theoretical complexity. For practical application, we propose several sequential algorithms to compute appropriate wavelength assignments. We also perform computational experiments to evaluate their performance. For the iterative algorithms, we identify characteristic patterns of progression. Two of these algorithms qualify for application in practice.

Report 03–46. Klaus Ehrhardt; Marc C. Steinbach. *Nonlinear Optimization in Gas Networks*.

Abstract: The operative planning problem in natural gas distribution networks is addressed. An optimization model focusing on the governing PDE and other nonlinear aspects is presented together with a suitable discretization for transient optimization in large networks by SQP methods. Computational results for a range of related dynamic test problems demonstrate the viability of the approach.

Report 03–47. Andreas May; Steffen Eisenhardt; Johannes Schmidt-Ehrenberg; Frank Cordes. *Rigid body docking for Virtual Screening*.

Abstract: A recently developed algorithm allows Rigid Body Docking of ligands to proteins, regardless of the accessibility and location of the binding site. The Docking procedure is divided into three subsequent optimization phases, two of which utilize rigid body dynamics. The last one is applied with the ligand already positioned inside the binding pocket and accounts for full flexibility. Initially, a combination of geometrical and force-field based methods is used as a Coarse Docking strategy, considering only Lennard-Jones interactions between the target and pharmaceutically relevant atoms or functional groups. The protein is subjected to a Hot Spot Analysis, which reveals points of high affinity in the protein environment towards these groups. The hot spots are distributed into different subsets according to their group affiliation. The ligand is described as a complementary point set, consisting of the same subsets. Both sets are matched in \mathbb{R}^3 , by superimposing members of the same subsets. In the first instance, steric inhibition is nearly neglected, preventing the system's trajectory from trapping in local minima and thus from finding false positive solutions. Hence the exact location of the binding site can be determined fast and reliably without any additional information.

Subsequently, errors resulting from approximations are minimized via finetuning, this time considering both Lennard-Jones and Coulomb forces. Finally, the potential energy of the whole complex is minimized. In a first evaluation, results are rated by a reduced scoring function considering only noncovalent interaction energies. Exemplary Screening results will be given for specific ligands.

Report 03–48. Alice Boit; Frank Cordes. *RNA 3D-Modeling*.

Abstract: This article presents a new computational approach to the three-dimensional (3D) modeling of ribonucleic acid (RNA) sequences with unknown spatial structure. The main concept is a mapping of the query sequence onto the 3D structures of a suitable template RNA molecule.

This technique called *threading* has originally been developed for the modeling of protein 3D structures. The application to RNA systems bridges the information gap between the growing mass of RNA sequence data and the relatively limited number of available 3D structures. The new RNA threading method is demonstrated on a tRNA model system because sufficient representative 3D structures have experimentally been elucidated and deposited in the public databases. Nevertheless, the method is in principle transferable on all other RNA species. Algorithms are developed that decompose these template structures into their secondary structure elements and gather this information in a specific template database.

The best template is chosen with public alignment and secondary structure prediction tools which are integrated in the RNA modeling module. The structural information gathered from the template and the best alignment is combined to establish a comprehensive 3D model of the query sequence. A range of complete tRNA structures has successfully been modeled with the RNA threading method. The prototype module visualizes the models and provides convenient access to the proposed 3D structures. Therefore, the method could give new insight into a variety of RNA systems which in the recent years have become increasingly important as potential new pharmaceutical agents.

Report 03–49. Alexander Kröller; Roland Wessäly. *Integrated Optimization of Hardware Configuration and Capacity Dimensioning in SDH and opaque WDM networks.*

Abstract: We suggest a new model for the design of telecommunication networks which integrates decisions about the topology, configuration of the switching hardware, link dimensioning, and protected routing of communication demands. Applying the branch-and-cut-algorithm implemented in our network planning and optimization tool DISCNET, we demonstrate that real-world based network planning instances of such an enhanced model can be solved.

Report 03–50. Thorsten Koch. *Verteilter Dokumenten-Speicher - Erfahrungen mit den Kluwer-Daten des Friedrich-Althoff-Konsortiums.*

Zusammenfassung: Dieser Bericht beschreibt die Erfahrungen, die bei der Speicherung von 240.000 als PDF Dateien vorliegenden Artikeln des Kluwer-Verlages gewonnen wurden. Darüber hinaus werden einige Überlegungen zu Metadatenextraktion und Indizierung aufgezeigt.

Report 03–51. Joachim Lügger (Redaktion). *Vorhaben: Offene Navigation und Suchmaschinen in Verbänden, Konsortien und den Wissenschaften; Schlussbericht zum Teilprojekt des BMBF-Vorhabens: Kompetenznetzwerk Neue Dienste, Standardisierung, Metadaten.*

Zusammenfassung: Die harmonische Integration der Navigation und Suche in lizenzierten Journalen und gleichzeitig in freien digitalen Dokumenten unter einer einheitlichen konsistenten Nutzeroberfläche ist eines der ungelösten F&E-Probleme der Fachinformation. Hierfür sollen Elemente des Invisible Web und

des Visible Web unter Berücksichtigung offener Standards nahtlos miteinander verbunden werden.

Dem Projekt liegt ein Modell mit Internet-Index, Metasuche und Open Linking über verteilten heterogenen Speichern zu Grunde: Verschiedenste Server, digitale Refe Datenbanken und auf Bestelldienste sollen unter Berücksichtigung von Standort-, Studien- und Lernbedingungen kooperativ miteinander vernetzt werden. Die Leistungsfähigkeit des Modells soll in Pilotimplementierungen getestet und für eine breite Anwendung vorbereitet werden. Auf dieser Basis soll das Vorhaben Verteilter Zeitschriftenserver der AG der Verbundsysteme in eigenen Teilprojekten kooperativ initiiert werden, das j Dokumentenserver von vascoda integriert ist.

Report 03–52. Ulrich Nowak; Aleksander Grah; Manfred Schreier. *Parameter Estimation and Accuracy Matching Strategies for 2-D Reactor Models.*

Abstract: The mathematical modeling of a special modular catalytic reactor kit leads to a system of partial differential equation in two space dimensions. As customary, this model contains unconfident physical parameters, which may be adapted to fit experimental data. To solve this nonlinear least squares problem we apply a damped Gauss-Newton method. A method of lines approach is used to evaluate the associated model equations. By an a priori spatial discretization a large DAE system is derived and integrated with an adaptive, linearly-implicit extrapolation method. For sensitivity evaluation we apply an internal numerical differentiation technique, which reuses linear algebra information from the model integration. In order not to interfere the control of the Gauss-Newton iteration these computations are done usually very accurately and, therefore, very costly. To overcome this difficulty, we discuss several accuracy adaptation strategies, e.g., a master-slave mode. Finally, we present some numerical experiments.

Report 03–53. Daniel Baum. *Finding All Maximal Cliques of a Family of Induced Subgraphs.*

Abstract: Many real world problems can be mapped onto graphs and solved with well-established efficient algorithms studied in graph theory. One such problem is to find large sets of points satisfying some mutual relationship. This problem can be transformed to the problem of finding all cliques of an undirected graph by mapping each point onto a vertex of the graph and connecting any two vertices by an edge whose corresponding points satisfy our desired relationship. Clique detection has been widely studied and there exist efficient algorithms. In this paper we study a related problem, where all points have a set of binary attributes, each of which is either 0 or 1. This is only a small limitation, since all discrete properties can be mapped onto binary attributes. In our case, we want to find large sets of points not only satisfying some mutual relationship; but, in addition, all points of a set also need to have at least one common attribute with value 1. The problem we described can be mapped onto a set of induced subgraphs, where each subgraph represents a single attribute. For attribute i , its

associated subgraph contains those vertices corresponding to the points with attribute i set to 1. We introduce the notion of a maximal clique of a family, \mathcal{G} , of induced subgraphs of an undirected graph, and show that determining all maximal cliques of \mathcal{G} solves our problem. Furthermore, we present an efficient algorithm to compute all maximal cliques of \mathcal{G} . The algorithm we propose is an extension of the widely used Bron-Kerbosch algorithm.

5.2 Mitherausgabe von Publikationen

Peter Deuffhard

- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Beijing, VR China
- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science, Niederlande
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag
- European Journal of Applied Mathematics (EJAM), Cambridge University Press, United Kingdom

Martin Grötschel

- Computational and Applied Mathematics, Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, Production: SOLGRAF Publicações, Rio de Janeiro, Brasilien
- Computing. Archives for Scientific Computing, Springer-Verlag, Wien, Österreich
- Mathematical Methods of Operations Research, Physica-Verlag (Springer-Verlag), Heidelberg
- Mathematical Programming A, Springer-Verlag, Berlin
- Mathematics of Operations Research, INFORMS, Linthicum, MD, USA
- Networks, John Wiley & Sons, New York, NY, USA
- Operations Research Letters, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Niederlande
- OR Transactions, Shanghai Scientific & Technological Publishing House, Shanghai, VR China
- SIAM Journal on Discrete Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, USA
- Surveys on Mathematics for Industry (SMI), Springer-Verlag, Wien, Österreich

Alexander Reinefeld

- Future Generation Computer Systems, Elsevier Science, Niederlande
- Journal of Grid Computing, Kluwer Academic Publishers, Niederlande

5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

1. K. I. Aardal, C. P. M. van Hoesel, A. M. C. A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and Solution Techniques for the Frequency Assignment Problem*, 4OR **1** (2003), 261–317.
2. M. Aigner, C. Bänsch, M. Grötschel, B. Lutz-Westphal, A. Unterreiter und G. M. Ziegler *Lebendige Mathematik! Berliner Thesen zum Mathematikunterricht*, Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung **4** (2003), 29–31.
3. A. Ali Khan, T. Bakeyev, M. Göckeler, R. Horsley, D. Pleiter, P. Rakow, A. Schäfer, G. Schierholz, H. Stüben, *Accelerating the Hybrid Monte Carlo Algorithm*, Phys. Lett. B564 (2003) 235–240.
4. G. Allen, K. Davis, K. N. Dolkas, N. D. Doulamis, T. Goodale, T. Kielmann, A. Merzky, J. Nabrzyski, J. Pukacki, T. Radke, M. Russell, E. Seidel, J. Shalf, I. Taylor, *Enabling Applications on the Grid: A GridLab Overview*, Int. Journal of High Performance Computing Applications, November 2003, vol. 17, no. 4, pp. 449–466 (18).
5. E. Amaldi, L.E. Trotter, Jr. und M.E. Pfetsch, *On the maximum feasible subsystem problem, IISs, and IIS-hypergraphs*, Math. Program. **95** (2003), Nr. 3, 533–554.
6. A. Andrzejak, K. Fukuda, *Debugging Distributed Computations by Reverse Search*, Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN'2003) , Februar 2003.
7. A. Andrzejak, *Memory-Efficient and Fast Enumeration of Global States*, 7th IEEE International Conference on Information Visualization, IV03-AGT, London, Juli 2003.
8. L. Becchetti, S. Leonardi, A. Marchetti-Spaccamela, G. Schäfer, und T. Vredeveld. *Average case and smoothed competitive analysis for the multi-level feedback algorithm*, Proceedings of the 44th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS), 462–471, 2003. Erhältlich als Report 03-14, ZIB, 2003.
9. A. Björner und F. H. Lutz, *A 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere and non-PL spheres with few vertices*, Electronic Geometry Model No. 2003.04.001 (2003), <http://www.eg-models.de/2003.04.001>.

10. A. Bley, *A lagrangian approach for integrated network design and routing in IP networks*, Tagungsband zur „International Network Optimization Conference 2003“ (Evry/Paris, Frankreich), Oktober 2003, 107–113.
11. A. Bley, A. M. C. A. Koster, A. Kröllner, R. Wessälly und A. Zymolka, *Kosten- und Qualitätsoptimierung in Kommunikationsnetzen*, Tele-Kommunikation Aktuell (2003), Nr. 07/08.
12. A. Bley und A. Zymolka, *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*, Tagungsband zum „Achten Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“ (Kassel), November 2003.
13. K. Bongs, S. Burger, D. Hellweg, M. Kottke, S. Dettmer, T. Rinkleff, L. Cacciapuoti, J. Arlt, K. Sengstock, and W. Ertmer, *Spectroscopy of Dark Soliton States in Bose-Einstein Condensates*, J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt., **5** (2003), S124.
14. R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Duty Scheduling in Public Transit*, Mathematics – Key Technology for the Future (W. Jäger und H.-J. Krebs, Hrsg.), Springer, 2003, 653–674.
15. C. Burch, R. Carr, S. O. Krumke, M. V. Marathe, C. Phillips und E. Sundberg, *A decomposition-based pseudoapproximation algorithm for network flow inhibition*, Network Interdiction and Stochastic Integer Programming (D.L. Woodruff, Hrsg.), Kluwer Academic Press, 2003, 51–68.
16. S. Burger, F. Schmidt, and L. Zschiedrich, *A fast and efficient finite-element solver for 2D and 3D photonic band-gap problems*, Dig. LEOS/IEEE 2003 Summer Topicals, 2003, pp. 75–76.
17. A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *A heuristic for the stacker crane problem on trees which is almost surely exact*, Proceedings of the 14th International Symposium on Algorithms and Computation, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2003, erscheint.
18. A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *Scheduling a server on a caterpillar network - a probabilistic analysis*, Proceedings of the 6th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems, 2003, 48–50, erhältlich als ZIB-Report 03-12, 2003.
19. F. Cordes, R. Preissner, Th. Steinke, *How Does a Protein Work?*, BioTOPics J. of Biotechnology Berlin-Brandenburg Edition **18** (02/2003), 4–5.
20. A. de Bruin, G. A. P. Kindervater, T. Vredeveld, und A. P. M. Wagelmans. *Finding a feasible solution for a class of distributed problems with a single sum constraint using agents*, Constraints, **8** (2003), 209–219.
21. P. Deuffhard, *From Molecular Dynamics to Conformational Dynamics in Drug Design*. In: M. Kirkilionis, S. Krömker, R. Rannacher, F. Toni (eds), Trends in

- Nonlinear Analysis, Springer-Verlag, pp. 269–288 (2003).
22. P. Deuffhard: *A Comparison of Related Concepts in Computational Chemistry and Mathematics*. In: Chemistry and Mathematics: Two Scientific Languages of the 21st Century. Nova Acta Leopoldina NF Bd. 88, Nr. 330, pp. 51–66 (2003).
 23. P. Deuffhard: *Maler, Mörder, Mathematiker*. Gegenworte: Der Mythos und die Wissenschaft. Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften (BBAW), 12. Heft, pp. 25–30 (2003).
 24. P. Deuffhard: *Maler, Mörder, Mathematiker*. Mitteilungen der DMV, pp. 16–21, Heft 4 (2003), Nachdruck aus Gegenworte [23].
 25. Andreas Eisenblätter, *Assigning frequencies in GSM networks*, Operations Research Proceedings 2002 (U. Leopold-Wildburger, F. Rendl und G. Wäscher, Hrsg.), Springer Verlag, 2003, Selected Papers of the International Conference on Operations Research (SOR 2002), Klagenfurt, 2–5 September 2002, 33–40.
 26. Hans-Florian Geerdes und Holger Karl, *The potential of relaying in cellular networks*, Proc. of INOC 2003 (Evry–Paris, France), INT, October 2003, 237–242.
 27. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *Realistic prediction of individual facial emotion expressions for craniofacial surgery simulations*, Proc. of SPIE Medical Imaging Conference, 520–527, San Diego, USA, 2003.
 28. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *On constitutive modeling of soft tissue for the long term prediction of cranio-maxillofacial surgery outcome*, In Proc. of Computer Assisted Radiology and Surgery CARS, 343–348, London, UK, 2003.
 29. S. Graupner, V. Kotov, A. Andrzejak, H. Trinks, *Service-Centric Organization of Globally Distributed Computing*, IEEE Internet Computing, Juli/August 2003.
 30. S. Graupner, A. Andrzejak, V. Kotov, H. Trinks, *Adaptive Control Overlay for Service Management* First Workshop on the Design of Self-Managing Systems (AASMS'2003), Juni 2003.
 31. M. Grötschel und M. Henk, *The Representation of Polyhedra by Polynomial Inequalities*, Discrete & Computational Geometry, **29** (2003), Nr. 4, 485–504.
 32. M. Grötschel, *Das elektronische Leben der Akademie*, Circular der BBAW, **28** (2003), 14–15.
 33. H.-C. Hege: *Creation and Visualization of Anatomical Models with Amira*. Proc. of 3D Modelling 2003, Paris, 7 p., April 23–24, 2003.
 34. H.-C. Hege, A. Hutanu, R. Kähler, A. Merzky, T. Radke, E. Seidel, B. Ullmer: *Progressive Retrieval and Hierarchical Visualization of Large Remote Data*. Proc. 2003 Workshop on Adaptive Grid Middleware, pp. 60–72, Sept. 2003.

35. R. Hiptmair and A. Schädle, *Non-reflecting boundary conditions for Maxwell's equations*, Computing, **71** (2003), no. 3, 265–292.
36. Thorsten Hohage, Frank Schmidt, and Lin Zschiedrich, *Solving Time-Harmonic Scattering Problems Based on the Pole Condition I: Theory*, SIAM J. Math. Anal. **35** (2003), no. 1, 183–210.
37. ———, *Solving Time-Harmonic Scattering Problems Based on the Pole Condition II: Convergence of the PML Method*, SIAM J. Math. Anal. **35** (2003), no. 3, 547–560.
38. I. Horenko, M. Weiser, *Adaptive integration of molecular dynamics*, J. Comput. Chem. **24** (2003), 1921–1929.
39. R. Hülsermann, M. Jäger, S. O. Krumke, D. Poensgen, J. Rambau und A. Tuchscherer, *Experimental study of routing algorithms in optical networks*, Proceedings of the 7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling, Kluwer Academic Press, 2003.
40. F. Hupfeld, *Hierarchical Structures in Attribute-based Namespaces and their Application to Browsing*, Report 03–06, ZIB, 2003.
41. C. A. J. Hurkens und T. Vredeveld. *Local search for multiprocessor scheduling: How many moves does it take to a local optimum?*, Operations Research Letters, **31** (2003) 137–141.
42. Y. Kadooka, N. Onishi, J.-W. Choi, Y.-H. Lee, H.-C. Hege, Y. Tago: *A Study on the PIV Virtual Laboratory by Web Grid Technology*. CD-ROM Proc. PIV'03 - 5th Int. Symp. on Particle Image Velomecity, Kyung Chun Kim (ed.), The Korean Society of Visualization, Busan, Korea, Sept. 22-24, 2003.
43. R. Kähler, M. Simon, H.-C. Hege: *Interactive Volume Rendering of Large Data Sets Using Adaptive Mesh Refinement Hierarchies*. IEEE Trans. Visual. and Comp. Graph., Vol. 9(3), pp. 341-351, 2003.
44. G.W. Klau, I. Ljubić, P. Mutzel, U. Pferschy und R. Weiskircher, *The fractional prize-collecting steiner tree problem on trees*, Proc. of Algorithms – ESA 2003 (European Symposium on Algorithms 2003) (Berlin) (G. Di Battista and U. Zwick, Hrsg.), Bd. 2032, Springer, 2003, pp. 691–702.
45. G.W. Klau und P. Mutzel, *Optimal labeling of point features in rectangular labeling models*, Math. Programming B, Special Issue on the 4th Aussois Meeting on Combinatorial Optimization (2000) **94** (2003), 435–458.
46. C. Kober, R. Sader, H.F. Zeilhofer, P. Deuffhard, *An Individual Anisotropic and Inhomogeneous Material Description of the Human Mandible*. In: V. Capasso (ed.), Mathematical Modelling & Computing in Biology and Medicine, ESTMB, Grenoble, pp. 103-109 (2003).
47. G. Konjevod, S.O. Krumke und M.V. Marathe, *Budget constrained minimum cost connected medians*, Journal of Discrete Algorithms (2003), erscheint.

48. A.M.C.A. Koster, A. Zymolka, M. Jäger, R. Hülsermann und C. Gerlach, *Demand-wise Shared Protection for Meshed Optical Networks*. In: *Proceedings of the 4th International Workshop on Design of Reliable Communication Networks (DRCN 2003)*, 85–92, Banff, Kanada, 2003.
49. A. Krölller und R. Wessály, *Integrated Optimization of Hardware Configuration and Capacity Dimensioning in SDH and opaque WDM networks*, Proceedings of the First International Network Optimization Conference (INOC 2003), Paris, Frankreich. Erhältlich als Report 03–49, ZIB, 2003.
50. S.O. Krumke, W.E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *News from the online traveling repairman*, Theoretical Computer Science **295** (2003), Nr. 1–3, 279–294.
51. S.O. Krumke, R. Liu, E.L. Lloyd, M.V. Marathe, R. Ramanathan und S.S. Ravi, *Topology control problems under symmetric and asymmetric power thresholds*, Proceedings of the International Conference on Ad hoc and Wireless Networks, 2003.
52. S.O. Krumke, N. Megow und T. Vredeveld, *How to whack moles*, Proceedings of the 1st Workshop on on Approximation and Online Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2003, erscheint.
53. H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß, S. Eulenstein, M. Westerhoff, H.-C. Hege: *Automatic Segmentation of the Liver for the Preoperative Planning of Resections*. Proc. MMVR 2003, Newport Beach, CA, pp. 171-174, Jan. 22-25, 2003.
54. H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß: *Erzeugung statistischer 3D-Formmodelle zur Segmentierung medizinischer Bilddaten*. Proc. BVM 2003, Erlangen, pp. 398-403, März 2003.
55. T. Lange, H. Lamecker, M. Seebaß: *Ein Softwarepaket für die modellbasierte Segmentierung anatomischer Strukturen*. Proc. BVM 2003, Erlangen, pp. 111-116, März 2003.
56. P. May, I. Koch, *PTGL - Protein Topology Graph Library*, ECCB - Proceedings of the European Conference on Computational Biology in conjunction with the French National Conference on Bioinformatics; eds. C. Christophe, H.-P. Lenhof, M-F. Sagot:193–194 (2003).
57. H.R. Morton und S.G. Lukac, *The Homfly polynomial of the decorated Hopf link*, J. Knot Theory Ramif. **12** (2003), Nr. 3, 395–416.
58. J. Nadobny, D. Sullivan, W. Wlodarczyk, P. Deuffhard, P. Wust, *A 3-D Tensor FDTD-Formulation for Treatment of Sloped Interfaces in Electrically Inhomogeneous Media*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. 51, No. 8, pp.1760-1770 (2003).
59. J. Nadobny, R. Pontalti, D. Sullivan, W. Wlodarczyk, A. Vaccari, P. Deuffhard, P. Wust, *A Thin-Rod Approximation for the Improved Modeling of Bare and*

- Insulated Cylindrical Antennas Using the FDTD Method. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 51, No. 8, pp.1780-1796 (2003).
60. S. Orlowski und R. Wessály, *Comparing Restoration Concepts using Optimal Network Configurations with Integrated Hardware and Routing Decisions*, Report 03–09, ZIB, 2003, Tagungsband der Konferenz DRCN (Design of Reliable Communication Networks) 2003, 15–22.
 61. P. Paar, J. Rekitke: *Geplante Landschaft wie sie der Spaziergänger kennt. Lenné3D: Entwicklung eines Programms zur Landschaftsvisualisierung*. In: Stadt+Grün, Patzer, Berlin-Hannover (2003)
 62. P. Paar: *Forschungsvorhaben Lenné3D Landschaften im Computer*. In: Garten + Landschaft, Callwey, München (2003)
 63. P. Paar, B. Warren-Kretzschmar: *Visualisierung Die Matrix der Planer*. Garten+Landschaft, Callwey, München (2003)
 64. P. Paar, B. Warren-Kretzschmar: *Trends in Landscape Modeling*. *Landscape Journal (CELA)* Herbst (2003)
 65. P. Paar: *Lenné3D - The Making of a New Landscape Visualization System: From Requirements Analysis and Feasibility Survey towards Prototyping*. In: E. Buhmann, S. Ervin (eds.), *Trends in Landscape Modeling, Proc. at Anhalt University of Applied Sciences*, Wichmann, Heidelberg (2003)
 66. J. Pfeifle und J. Rambau, *Computing triangulations using oriented matroids*, *Algebra, Geometry and Software Systems* (M. Joswig und N. Takayama, Hrsg.), Springer, 2003.
 67. A. Reinefeld, F. Schintke, *Grid Computing in Deutschland*, *Spektrum der Wissenschaft*, Juli 2003, pp. 72–73.
 68. T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld, *From Clusters to the Fabric: The Job Management Perspective*, *IEEE Intl. Conference on Cluster Computing (Cluster 2003)*, Hongkong, Dezember 2003, pp. 468–473.
 69. J. Rolia, A. Andrzejak, M. Arlitt, *Automating Enterprise Application Placement in Resource Utilities*, *14th IFIP/IEEE Workshop on Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2003)*, Oktober 2003.
 70. M.J. Rosenberg, R. Agarwala, G. Bouffard, J. Davis, G. Fiermonte, M.S. Hilliard, T. Koch, L.M. Kalikin, I. Makalowska, D.H. Morton, E.M. Petty, J.L. Weber, F. Palmieri, R.I. Kelley, A.A. Schäffer und L.G. Biesecker, *Mutant deoxynucleotide carrier DNC is associated with congenital microcephaly*, *Nature Genetics* **32** (2002), 175–179.
 71. K. Rother, S. Trissl, H. Müller, P. May, R. Heek, R. Preissner, T. Steinke, I. Koch, U. Leser, C. Frömmel, *COLUMBA – A Database of Annotations of Protein Structure*, *ECCB 2003*, September 2003, Paris, pp. 109–110.

72. F. Schintke, A. Reinefeld, *Modeling Replica Availability in Large Data Grids*, Journal of Grid Computing (2) 2003, Kluwer Acad. Publisher.
73. F. Schintke, T. Schütt, A. Reinefeld, *A Framework for Self-Optimizing Grids Using P2P Components*, Intl. Workshop on Autonomic Computing Systems, 14th Intl. Workshop on Database and Expert Systems Applications (DEXA'03), September 2003, pp. 689–693.
74. F. Schmidt and L. Zschiedrich, *Adaptive numerical methods for problems of integrated optics*, Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies VII (Yakov S. Sidorin and Ari Tervonen, eds.), Proceedings of SPIE, vol. 4987, 2003, pp. 83–94.
75. Frank Schmidt, Tilmann Friese, Lin Zschiedrich, and Peter Deuffhard, *Adaptive Multigrid Methods for the Vectorial Maxwell Eigenvalue Problem for Optical Waveguide Design*, Mathematics - Key Technology for the Future: Joint Problems between Universities and Industry (W. Jäger et al., ed.), Springer, 2003, pp. 270–292.
76. T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld, *Efficient Synchronization of Replicated Data in Distributed Systems*, Intl. Conf. on Computational Science ICCS - 2003, St. Petersburg, Juni 2003, Springer LNCS 2657, pp. 274–283.
77. Wolfram Sperber, *Math&Industry – wie präsentiert man Projekte der angewandten Mathematik im Web?*, Proceedings der Berliner XML-Tage, Berlin 2003, ISBN 3-88579-116-1, S.328-340.
78. Wolfram Sperber, *Math&Industry: Sharing Knowledge between Mathematics and Industry*, Proceedings zum 9. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, to appear.
79. H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Saddle Connectors - An Approach to Visualizing the Topological Skeleton of Complex 3D Vector Fields*. IEEE Visualization 2003, Seattle, pp. 225–
80. B. Ullmer, A. Hutanu, W. Benger, H.-C. Hege: *Emerging Tangible Interfaces for Facilitating Collaborative Immersive Visualizations*. Proc. NSF Lake Tahoe Workshop on Collaborative Virtual Reality and Visualization, Oct. 2003.
81. B. Ullmer, H. Ishii, R. Jacob: *Tangible Query Interfaces: Physically Constrained Tokens for Manipulating Database Queries*. Proc. INTERACT'03, Sept. 2003. 232, October 2003.
82. C.P.M. van Hoesel, A.M.C.A. Koster, R.L.M.J. van de Leensel und M.W.P. Savelsbergh, *Bidirected/unidirected capacity installation in telecommunication networks*, Discrete Applied Mathematics **133** (2003), 103–121.
83. T. Vredeveld und J.K. Lenstra. *On local search for the generalized graph coloring problem*, Operations Research Letters, **31** (2003), 28–34.

84. T. Weinkauff, H.-C. Hege, B.R. Noack, M. Schlegel, A. Dillmann: *Coherent Structures in a Transitional Flow around a Backward-facing Step*. Physics of Fluids, Vol. 15, p. S3, Sept. 2003 (Winning Entry from the Gallery of Fluid Motion 2003).
85. J. Wendler, J. Bach, *Case Based Behavior Assessment in Simulated Robotic Soccer*, Modellierung und Simulation menschlichen Verhaltens, Informatik-Bericht Nr. 163, Humboldt-Universität zu Berlin, März 2003.
86. J. Wendler, J. Bach, *Recognizing and Predicting Agent Behavior with Case Based Reasoning*, Proceedings of the 7th RoboCup Workshop, Padua, Juli 2003.
87. S. Zachow, E. Gladilin, R. Sader, H.-F. Zeilhofer: *Draw & Cut: Intuitive 3D Osteotomy Planning on Polygonal Bone Models*. Computer Assisted Radiology and Surgery, p. 362-369, London, 2003.
88. A. Zaikin, P. Saporin, S. Prohaska, J. Kurths, W. Gowin: *2D and 3D Bone Modelling for Analysis of Changes in the Bone Architecture and for Evaluation of Structural Measures*. Proc. 2nd Europ. Congr. Achievements in Space Medicine into Health Care Practice and Industry, p. 100-106, Berlin, March 27-29, 2003.
89. A. Zymolka, A.M.C.A. Koster und R. Wessály, *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*. In: *Proceedings of the 7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)*, 61–80, Budapest, Hungary, 2003.

5.4 Monographien

1. P. Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems: Affine Invariance and Adaptive Algorithms*. Springer Series in Computational Mathematics, SCM 35, Springer-Verlag, 2004, ISBN 3-540-21099-7.
2. P. Deuffhard, A. Hohmann, *Numerical Analysis in Modern Scientific Computing: An Introduction*. Second revised and extended edition. Texts in Applied Mathematics 43, Springer-Verlag 2003, ISBN 0-387-95410-4.
3. H.-C. Hege, K. Polthier (eds.): *Visualization and Mathematics III – Geometry, Topology, and Numerics* 469 pp., 240 figs., 47 figs. in color, Springer-Verlag Heidelberg, 2003, ISBN 3-540-01295-8.
4. D. Poensgen, *Facets of Online Optimization*, Dissertation, Cuvillier Verlag Göttingen, 2003, ISBN 3-89873-919-8.

5.5 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Evgeny Gladilin (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Biomechanical Modeling of Soft Tissue and Facial Expressions for Craniofacial Surgery Planning

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Diana Poensgen (Abt. Optimierung)

Facets of Online Optimization: Online Dial-a-Ride Problems and Dynamic Configuration of All-Optical Networks

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Luis Miguel Torres Carvajal (Abt. Optimierung)

Online Vehicle Routing

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.6 Diplomarbeiten

Freie Universität Berlin

Stefan Sauer (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Gauss–Newton–Verfahren in der Cluster Analyse

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Alice Boit (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

RNA 3D-Modeling

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)

Simon Rieche (Abt. Computer Science Research)

Lastbalancierung in Peer-to-Peer-Systemen

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Hartwig Bosse (Abt. Optimierung)

Describing Polyhedra by Polynomial Inequalities

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Luiza Fadejeva (Abt. Optimierung)

Ein Column-Generation-Ansatz zur Kostenoptimierung von ausfallsicheren

Kommunikationsnetzen mit Single-Path-Routing
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Philipp Friese (Abt. Optimierung)

Echtzeitsteuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Alexander Kröller (Abt. Optimierung)

Network optimization: Integration of Hardware Configuration and Capacity Dimensioning
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Samuel Matthaei (Abt. Optimierung)

Heuristische Bestimmung von Kantengewichten zur Routing-Optimierung in IP-Netzen
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Ulrich Menne (Abt. Optimierung)

LP approaches to survivable networks with single path routing
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Sebastian Orlowski (Abt. Optimierung)

Local and global restoration of node and link failures in telecommunication networks
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Matthias Peinhardt (Abt. Optimierung)

Integer Multicommodity Flows in Optical Networks
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Marc Pinn (Abt. Optimierung)

Lösung des k -Knotenpartitionierungsproblems von Graphen mit semidefiniter Programmierung
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Thomas Schlechte (Abt. Optimierung)

Das Resource-Constrained-Shortest-Path-Problem und seine Anwendung in der ÖPNV-Dienstplanung
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Mathias Schulz (Abt. Optimierung)

Solving Frequency Assignment Problems with Constraint Programming
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Nilgün Tayab (Abt. Optimierung)

Pivot-Strategien für SAT-Probleme
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Andreas Tuchscherer (Abt. Optimierung)*Dynamical Configuration of Transparent Optical Telecommunication Networks*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

William Wieprecht (Abt. Optimierung)*Mathematische Modellierung von Nahverkehrssystemen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Universität Hamburg**Mohammad-Hassan Farshbaf-Shaker** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Ein neues Verfahren zur Lösung des Streuproblems der Maxwell-Gleichungen*

Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)

Universität Lübeck**Eva Lange** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Cholesky-Iterationsverfahren für reversible stochastische Eigenwertprobleme*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Berufsakademie Berlin**Erik Thurmann** (Abt. Interne Rechenzentrumsdienste)*Konzeption und Realisierung einer universell handhabbaren Schnittstelle für Anwender des auf dem IP-Protokoll IMAP basierenden E-Mail-Servers des ZIB*

Betreuer: Wolfgang Pyszkalski (ZIB)

Technische Fachhochschule Berlin**David Pluntze** (Abt. Scientific Software)*Numerische Simulation neuronaler Kompartimentmodelle.*

Betreuer: Norbert Kalus (TFH), Ulrich Nowak (ZIB)

SOFTWARE

6.1 Numerische Algorithmen

CodeLib

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von numerischen Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet “Scientific Computing”.

Weitere Informationen finden sich auf den CodeLib Webseiten unter: <http://www.zib.de/SciSoft/CodeLib/> oder <http://www.zib.de/SciSoft/CodeLab/>.

Schwerpunkt der Entwicklungs- und Pflegearbeiten war im Berichtszeitraum die Weiterentwicklung der KARDOS/KASKADE-Software zur Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen.

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

VTL

Die C++-Bibliothek VTL (Views Template Library) bildet eine dünne Abstraktionsschicht über der Standard Template Library. Sie stellt verschiedene dynamisch berechnete Sichten auf Datensätze zur Verfügung, so dass auf Untermengen oder abgewandelte Daten zugegriffen werden kann, ohne die zugrundeliegenden Datensätze zu kopieren. Durch die Verwendung moderner Template-Techniken wird dabei eine besonders hohe Flexibilität in der Anwendung ermöglicht. VTL ist frei erhältlich (<http://www.zib.de/weiser/vtl/>).

Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

6.2 Visualisierung

Amira

AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildanalyse, Geometrie-Rekonstruktion und Datenvisualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzeroberfläche und kann per

Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkern kann um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für viele Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren. Kooperationspartner des ZIB können die Software kostenfrei erhalten.

Eine professionelle End-User-Version mit einem ausgewählten Satz von Modulen sowie eine erweiterbare Entwickler-Version werden vom ZIB SpinOff Indeed – Visual Concepts GmbH entwickelt und über den Vertriebspartner TGS weltweit kommerziell angeboten. Es werden die Betriebssysteme Windows 98/ME/NT4/2000/XP, Linux (RedHat 8.0 mit glibc-2.3.2 oder höher), LinuxIA64 (RedHat AW 2.1), SGI IRIX 6.5.x, SUN Solaris 8/9 sowie HP-UX 11.0 unterstützt. Die derzeit aktuelle Version ist Amira 3.1, released im Oktober 2003.

Daneben gibt es AMIRADEV, eine erweiterbare Version von AMIRA für programmierende Anwender, und AMIRAVR, eine Version zur Nutzung von Amira in Virtual-Reality-Umgebungen. Erweiterungen zur Visualisierung molekularer Strukturen und zur visuellen Konformationsanalyse werden unter dem Namen AMIRAMOL angeboten. Module zur Entfaltung von Mikroskopbildern sind in der Erweiterung AMIRADECONV zusammengefasst.

Neu hinzugekommen im Jahr 2003 ist AMIRAVR.CLUSTER, eine auf PC-Clustern lauffähige Version von AMIRAVR, zum Betrieb von Rundum-Stereo-Displays.

Aktuelle Informationen finden sich unter <http://amira.zib.de>.

Ansprechpartner: Detlev Stalling (stalling@zib.de)

HyperPlan

HyperPlan ist eine fachspezifische Erweiterung des oben beschriebenen Softwaresystems *Amira*. Das System dient dazu, Hyperthermie-Behandlungen in der Krebstherapie computer-gestützt vor auszuplanen. *HyperPlan* enthält Komponenten zur Visualisierung, Modellerstellung, Simulation und Optimierung und integriert damit alle notwendigen Werkzeuge zur Erstellung von patientenspezifischen Behandlungsplänen.

Das System wird von der Firma Dr. Sennwald Medizintechnik GmbH (München) kommerziell vertrieben.

Ansprechpartner: Detlev Stalling (stalling@zib.de)

6.3 Optimierung

SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplex Verfahrens. Es beinhaltet sowohl primale wie duale Lösungsroutinen und ist als C++ Klassenbibliothek implementiert.

SoPlex kann als Unteroutine in anderen Programmen, wie auch selbständig verwendet werden und Probleme im MPS und LP Format einlesen.

Der Code wurde von Roland Wunderling am ZIB als Teil seiner Dissertation *Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus* (Report 96–09) entwickelt.

Der Code wird derzeit ständig gewartet und weiterentwickelt.

Weitere Informationen finden sich unter

<http://www.zib.de/Optimization/Software/Soplex>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

IS-OPT

IS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung im öffentlichen Personennahverkehr. Es erlaubt die simultane Planung von Fahrzeugumläufen und Fahrdiensten für regionale und städtische Szenarien. Dies erspart Planungsarbeit und setzt zusätzliche Optimierungspotenziale gegenüber einer herkömmlichen sequentiellen Planung frei.

IS-OPT ist in die kommerziellen Planungssysteme MICROBUS 2 der IVU Traffic Technologies AG (Berlin) und DIVA der Mentz Datenverarbeitung GmbH (München) integriert. Das Tool wurde erfolgreich bei der Regensburger Verkehrsverbund GmbH getestet.

IS-OPT wurde im BMBF-Förderprogramm „Neue mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“ (FKZ 03-GR7ZI1-4) entwickelt.

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer (borndoerfer@zib.de), Andreas Löbel (loebel@zib.de), Steffen Weider (weider@zib.de)

MCF

MCF ist eine Implementierung eines primalen und dualen Netzwerk-Simplex-Algorithmus zur Lösung linearer Netzwerk-Fluss-Probleme. Für eine akademische Nutzung ist MCF frei verfügbar.

Das Programmpaket wurde evaluiert anhand mehrerer Klassen verschiedener mit NETGEN erzeugter Standardprobleme und mit Instanzen realer Anwendungen aus der Fahrzeugeinsatzplanung im ÖPNV und der Telekommunikation. Rechentests auf diesen Beispielen zeigten immer ein hervorragendes Laufzeitverhalten von MCF. Selbst riesige Instanzen aus der Praxis mit mehreren tausend Knoten und hundertmillionen Bögen können innerhalb kürzester Zeit optimal gelöst werden.

MCF findet derzeit Anwendung in verschiedenen Bereichen. Neben Integrationen in kommerziellen Planungssystemen für den ÖPNV ist MCF ein Integer-Benchmark in der SPEC CPU 2000 Suite (siehe www.spec.org).

Von Antonio Frangioni ist eine C++-Portierung verfügbar, die verschiedene Implementierungen von Netzwerk-Fluss-Lösern vergleichbar macht.¹

Ansprechpartner: Andreas Löbel (loebel@zib.de)

LP-Basisverifizierer perPlex

PerPlex ist ein Programm um die Zulässigkeit, Optimalität und Ganzzahligkeit von LP-Lösungen zu verifizieren. Zu einem gegebenen Linearen Programm im MPS-Format und einer Basis berechnet perPlex die primalen und dualen Variablen mit rationaler Arithmetik und bestimmt, ob die Basis tatsächlich zulässig und optimal ist. Die Ganzzahligkeit von ganzzahligen Variablen kann ebenfalls überprüft werden. Die exakten Werte der Zielfunktion und der Variablen werden ausgegeben.

Mit Hilfe von perPlex ist es gelungen, für alle Instanzen der Netlib-LP-Sammlung <http://elib.zib.de/netlib/lp> die bewiesenen optimalen Zielfunktionswerte zu bestimmen.

PerPlex ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/perplex>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

Modellierungssprache Zimpl

Zimpl ist eine Programmiersprache um das mathematische Modell eines Problems in ein lineares (LP) oder gemischt-ganzzahliges Programm (MIP) zu übersetzen. Das Ergebnis wird als MPS-Datei oder LP-Datei geschrieben und kann dann von gängigen LP-Lösern, z. B. SoPlex (siehe Abschnitt 6.3), und MIP-Lösern (siehe Projekt *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*) verarbeitet werden.

Das links stehende lineare Programm lässt sich in Zimpl wie rechts angegeben schreiben:

	<code>var x;</code>
	<code>var y;</code>
<code>min 2x + 3y</code>	<code>minimize cost: 2 * x + 3 * y;</code>
<code>subject to x + y ≤ 6</code>	<code>subto c0: x + y ≤ 6;</code>
<code> x, y ≥ 0</code>	

Man erhält dann die zugehörige MPS-Datei:

```

NAME          ex1.mps
ROWS
  N  OBJECTIV
  L  c0
COLUMNS
      x          OBJECTIV          2

```

¹Siehe <http://www.di.unipi.it/di/groups/optimize/Software/MCF.html>

x	c0	1
y	OBJECTIV	3
y	c0	1
RHS		
RHS	c0	6
ENDATA		

Zimply wurde wieder in mehreren Projekten und Vorlesungen erfolgreich eingesetzt. Das Programm wird weiterhin entsprechend den Anforderungen in den Projekten weiterentwickelt. In 2003 wurde die interne Representation von Zahlen auf rationale Arithmetik umgestellt, um sicher stellen zu können, dass bei der Umwandlung des Modells keine Rundungsfehler auftreten. Des Weiteren wurden erste Preprocessing-Algorithmen ebenfalls in rationaler Arithmetik implementiert.

Zimply ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/zimply>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

Porta

Porta (POLYhedron Representation Transformation Algorithm) ist eine Sammlung von Algorithmen zur Analyse von Polytopen und Polyedern. Insbesondere können deren äußere Beschreibungen (Ungleichungen) und innere Beschreibungen (Ecken) ineinander umgerechnet werden. Porta ist ursprünglich von Thomas Christof programmiert worden und wird hier in einer von Andreas Löbel überarbeiteten Fassung ohne Support bereitgestellt.

Porta steht unter der Gnu Public Licence und kann unter

<http://www.zib.de/Optimization/Software/Porta/>

kostenfrei heruntergeladen werden.

Ansprechpartner: Andreas Löbel (loebel@zib.de)

TOPCOM

TOPCOM ist eine Programmsammlung zur Berechnung von Triangulierungen von Punktkonfigurationen und orientierten Matroiden. Der Implementierung liegt die Idee zugrunde, die wesentlichen kombinatorischen Eigenschaften einer Punktkonfiguration als orientiertes Matroid zu speichern. Damit können alle nachfolgenden Berechnungen koordinatenfrei und damit ohne Rundungsfehler erfolgen.

TOPCOM kann ab Version 0.10.0 (2001) auch die Regularität von Triangulierungen prüfen. Hierzu wird das cddlib-Paket von Komei Fukuda mit exakter Arithmetik benutzt.

Ferner kann TOPCOM seit 2003 mögliche Höhenvektoren für reguläre Triangulierungen ausgeben; diese können z. B. vom Programmpaket CatS von Anders Nedergaard Jensen <http://www.soopadoopa.dk/anders/cats/cats.html> zur Berechnung des sogenannten State-Polytops der Punktkonfiguration weiterverwendet werden.

Siehe

<http://www.zib.de/rambau/TOPCOM>

für ständig aktualisierte Informationen.

Ansprechpartner: Jörg Rambau (rambau@zib.de)

AMSEL

AMSEL (A Modelling and Simulation Environment Library) ist eine C-Bibliothek, die die Programmierung von Diskreten Ereignisbasierten Simulationsprogrammen unterstützt. AMSEL wurde ursprünglich von Norbert Ascheuer entwickelt und wird jetzt in einer von Jörg Rambau überarbeiteten Fassung vom ZIB unter der ZIB Academic Licence zur Verfügung gestellt.

Siehe

<http://www.zib.de/Optimization/Software/Amsel/>

für weitere Informationen.

Ansprechpartner: Jörg Rambau (rambau@zib.de)

DISCNET

Am Konrad-Zuse-Zentrum wurde von 1994–2001 die Software DISCNET entwickelt, welche seitdem vorrangig von der Firma atesio, einem Spin-Off des ZIB, fortentwickelt wird. DISCNET ist ein Optimierungskern, bestehend aus einer Vielzahl mächtiger Modelle und Algorithmen zur Konfiguration, Planung und Optimierung von Kommunikationsnetzen. Die für DISCNET entwickelte Mathematik wurde mit dem Mannesmann Innovationspreis 2001 ausgezeichnet und erlaubt es unseren Projektpartnern seit nun fast 10 Jahren, ihre Netze qualitativ hochwertiger bei minimalen Kosten zu planen. In der Anwendung beim Betreiber konnten Kosteneinsparungspotentiale von 30 Prozent und mehr aufgezeigt werden. Referenzen sind Betreiber wie der DFN, E-Plus, Telekom Austria, und T-Systems Nova für so technologisch verschiedene Netze wie IP/OSPF-, PDH-, SDH-, WDM- oder auch Mietleitungsnetze. Weitere Informationen unter www.atesio.de

Ansprechpartner: Roland Wessäly (wessaely@zib.de)

6.4 Computeralgebra

Verfahren für REDUCE

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) in der Version 4.2 und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.). Im Jahre 1999 wurde die Version 3.7 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russland), Queen Mary and Westfield College (London), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Software-Händler in Japan, Korea, Indien, Griechenland und Polen.

An vielen Modulen wurden im Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der aktuellen REDUCE Version 3.7 sowie der Version REDUCE 3.8, die im ersten Quartal 2004 freigegeben wird.

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell, S. Kameny)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner-Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H.M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
INEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
LINALG	Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebbeck)
MATHML	Interface zu MathML (L. Alvarez)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)
NORMFORM	Normalformen von Matrizen (M. Rebbeck, T. Moulders)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
QSUM	Summation von q-hypergeometrischen Termen (H. Böing, W. Koepf)
RATINT	Rationale Integration (N. Langmead)
RATAPRX	Rationale Approximation (L. Temme, W. Koepf)
REACTEQN	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)

SPARSE	Sparse Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)
TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGINT	Trigonometrische Integration (N. Langmead)
TRIGSIMP	Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG	Symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)
ZTRANS	Z-Transformation und inverse Z-Transformation (W. Koepf, L. Temme)

Diese Pakete sind entweder Bestandteil des Systems REDUCE oder – falls sie nach der letzten Version entwickelt wurden – über anonymous FTP abrufbar.

Ansprechpartner: Winfried Neun (neun@zib.de)

Verfahren für Mathematica

SpecialFunctions

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen, symbolischer Potenzreihen, orthogonaler Polynome und holonomer spezieller Funktionen.*

Ansprechpartner: Wolfram Koepf (koepf@zib.de)

Verfahren für Maple

FPS	D. Gruntz, W. Koepf: <i>Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.</i> Es ist ferner Teil der <code>share</code> library ab Maple Version V.3.
summation	W. Koepf, G. Stölting: <i>Ein Maple Package für die symbolische Summation.</i> Es ist ferner Teil der <code>share</code> library ab Maple Version V.4.
sumtools	W. Koepf: <i>Eine Maple Library für die symbolische Summation.</i> Die Library ist Teil von Maple Version V.4.
hsum.mpl	W. Koepf: <i>Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities.</i>
qsum.mpl	H. Böing: <i>Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation.</i>
moregroebner	Version 3.1 (K. Gatermann) Maple V.5–Paket zur Berechnung von Gröbner–Basen von Idealen und Modulen, Hilbert-Reihen.

symmetry Version 3.1 (K. Gatermann, F. Guyard) Maple V.5 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik.

Ansprechpartner: Wolfram Koepf (<http://www.zib.de/koepf>), Karin Gatermann (gatermann@zib.de)

6.5 Computer Science

ldasim - Simulator für Speicherhierarchien

`ldasim` ist ein Simulator für Speicherhierarchien zum Berechnen des Einflusses von Speicherzugriffen auf die Ausführungsdauer eines Programms. Der `ldasim` arbeitet nach dem Latency-of-Data-Access (LDA) Kostenmodell, das beliebig viele hierarchische Speicherebenen mit unterschiedlichen Latenzzeiten berücksichtigt. Der Simulator kann für Systeme mit unterschiedlichen Speicherarchitekturen konfiguriert werden und unterstützt auch Mehrprozessorsysteme mit gemeinsamem Speicher (SMP-Systeme) mit verschiedenen Kohärenzprotokollen.

Die Ergebnisse des Simulators können der Optimierung von Speicherhierarchien oder der Optimierung von Programmen dienen. Die Analyse eines Programms erfolgt während dessen Ausführung auf einem von der simulierten Rechnerarchitektur unabhängigen Rechner, nachdem das Programm von Hand instrumentiert wurde.

Der Simulator wurde in C++ implementiert und unter der GNU General Public License veröffentlicht.

Detaillierte Beschreibungen von `ldasim` liegen im Report 00-33, ZIB, 2000 vor, aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.zib.de/~schintke/ldasim/>.

Ansprechpartner: Florian Schintke (schintke@zib.de)

nsync - Synchronisation von verteilten Verzeichnisstrukturen

`nsync` ist ein Tool zur Synchronisation von Datei-Verzeichnissen in verteilten Systemen. Es wurde insbesondere für das Management verteilter Daten für e-Science-Anwendungen (enhanced science) entwickelt. Im Grid Computing ist es notwendig, viele Tausend oder gar Millionen von Dateien, die in unterschiedlichen Rechenzentren verteilt gespeichert sind, regelmäßig zu synchronisieren. Auch in Cluster-Systemen drängt sich mit zunehmender Knotenanzahl der Einsatz von `nsync` auf.

Das Verfahren arbeitet ohne zentrale Instanz; die Synchronisation wird vollkommen verteilt und nebenläufig ausgeführt. Vor der eigentlichen Synchronisation werden Konflikte zwischen den Kopien erkannt und ein Ablaufplan erstellt. Der Ablaufplan, der selbst wieder parallel berechnet wird, berücksichtigt die Netzwerktopologie zwischen den Knoten und kann sich sowohl an unterschiedliche Topologien als auch an unter-

schiedliche Netzwerk-Bandbreiten anpassen.

`nsync` wurde in C++ geschrieben und unter der GNU General Public License veröffentlicht. Detaillierte Beschreibungen von `nsync` wurden auf wissenschaftlichen Konferenzen veröffentlicht und finden sich neben aktuellen Informationen unter <http://www.zib.de/schuett/nsync>.

Ansprechpartner: Thorsten Schütt (schuett@zib.de)

dmSCP - Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet

Im Zusammenhang mit Sicherheitsproblemen im Internet wird die Nutzung klassischer Dateitransfertools (wie `ftp`) zunehmend erschwert. Das mit der Secure Shell (`ssh`) gekoppelte `scp` ist wegen der Verschlüsselung der Nutzdaten für große Datenmengen ungeeignet. Eine Kompromisslösung ist das ebenfalls auf `ssh` aufsetzende im ZIB entwickelte Produkt `dmSCP`. Hier geschieht die Sitzungssteuerung und das Übertragen der Metadaten verschlüsselt und die Nutzdaten werden unverschlüsselt übertragen. Eine Reihe von Maßnahmen verhindert das unbemerkte Verändern der Nutzdaten innerhalb des Netzes. Zusätzlich hat `dmSCP` eine Reihe von Features, die im Zusammenhang mit Data Migration stehen, wie Filefragmentierung und Handeln voller Dateisysteme. Aufgrund von Optimierung sowohl in der rechnerlokalen Ein-/Ausgabe als auch im Netz ist `dmSCP` bis zu zweimal schneller als `ftp`. `dmSCP` wird deutschlandweit vor allem im Hochleistungsbereich und an einigen wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA genutzt.

(siehe auch http://mss.zib.de/mss/dmSCP_paper_20000220.ps). Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://mss.zib.de/mss>.

Ansprechpartner: Manfred Stolle (stolle@zib.de)

Abstraction Layer

Die Ausführung von Programmen auf Clustern von PCs wird durch Batch-Systeme gesteuert. Der Abstraction Layer ermöglicht die Erweiterung der Funktionalität von Batch-Systemen. Ein Dämon nimmt Anfragen für das Abfragen des Zustandes des Batch-Systems und für die Kontrolle der Jobs entgegen, adaptiert sie und leitet sie an das Batch-System weiter. Der Dämon bietet eine Schnittstelle zum virtuellen Ab- und Anschalten von Rechenknoten.

Der Abstraction Layer unterstützt die Batch-Systeme OpenPBS und LSF. Weitere Informationen über den Abstraction Layer enthält die WWW-Seite <http://www.zib.de/CSR/Software/AbstractionLayer/>.

Ansprechpartner: Thomas Röblitz (roebnitz@zib.de)

GuiGen

GuiGen ist ein Editor für graphische Formulare, der als internes Format XML verwendet wird. Mit Hilfe einer Java Applikation kann ein Formular dem Nutzer zum Ausfüllen präsentiert werden. Syntaxchecks auf Basis von regulären Ausdrücken kontrollieren, ob die Formularfelder mit sinnvollem Inhalt gefüllt wurden. Das ausgefüllte Formular kann dann wieder mittels XML transferiert und mit Hilfe von sogenannten Templates ausgewertet werden. Im Rahmen des Unicore Projektes (<http://www.kfa-juelich.de/zam/RD/coop/unicoreplus/>) wurde dieses System zum einfachen, transparenten Zugriff auf Hochleistungsrechner genutzt. Mit ihm ist es auf einfache Weise möglich, fachspezifische Benutzerschnittstellen für Standardpakete wie BLAST oder Fluent zu erstellen und Simulationen auf verschiedenen Rechnerarchitekturen und Konfigurationen auszuführen.

Weitere Informationen unter <http://www.zib.de/CSR/Software/index.en.html>

Ansprechpartner: Hinnerk Stüben (stueben@zib.de)

Information Provider

Die Information Provider ermitteln die Zustandsinformationen eines Batch-Systems und präsentieren diese in einem speziellen Format. Dieses Format, auch als Glue Schema bezeichnet, wird von Informationsdiensten genutzt, um Ressourcen in einheitlicher Art und Weise darzustellen. Die Informationsdienste werden im Grid-Computing abgefragt, um zu einer Job-Anfrage passende Ressourcen zu finden.

Die Information Provider unterstützen die Batch-Systeme OpenPBS, LSF und Condor. Eine ausführlichere Beschreibung der Information Provider enthält die WWW-Seite <http://www.zib.de/CSR/Software/InformationProvider/>.

Ansprechpartner: Thomas Röblitz (roebnitz@zib.de)

libst

Die libst ist eine Kommunikationsbibliothek, die es Anwendungen ermöglicht, mittels des Scheduled Transfer Protokolls (siehe <http://www.hippi.org/cST.html>) über Gigabit Ethernet Daten auszutauschen. Die Besonderheit des ST-Protokolls besteht darin, bereits vor dem Übertragen der Daten beim Empfänger genügend Ressourcen bereitzuhalten und so eine Be- bzw. Überlastung zu verhindern. Auf diese Weise ist es möglich, mit hoher Datenrate zu kommunizieren und gleichzeitig sinnvolle Rechenarbeit auszuführen.

Ansprechpartner: Sebastian Heidl (heidl@zib.de)

StorageBox

Persönliche Daten werden heute meist in Dateien auf Festplatte oder in speziellen Datenbanken von Programmen abgelegt. Die gemeinsame Verwaltung der so gespeicherten Daten ist somit meist unmöglich. Auch die immer wichtiger werdende Verteilung der Daten auf mehrere Geräte ist höchstens als Insellösung verfügbar. StorageBox ist eine persönliche Datenbank, die diese Probleme angeht. Sie ist darauf ausgelegt, persönliche Daten auf allen Geräten des Benutzers zu verwalten und konsistent halten zu können. Änderungen, die auf einem Gerät gemacht wurden, werden bei Gelegenheit auch über Dritte an alle anderen Geräte weitergegeben. StorageBox benutzt keinen speziellen Datenspeicher, sondern setzt direkt auf das Dateisystem auf, und kann somit ohne weitere Vorbereitungen die vorhandenen Dateien einbinden. Bei der Verwaltung der Daten ist der Benutzer nicht auf die klassische Ordnerstruktur festgelegt, sondern kann die Dateien mit beliebigen Attributen zur Kategorisierung versehen.

Weitere Informationen unter <http://www.storagebox.org/>

Ansprechpartner: Felix Hupfeld (hupfeld@zib.de)

6.6 Informationsdienste

Math-Net Informationsserver

Unter der WWW-Adresse <http://www.math-net.org> befindet sich das Portal des Math-Net. Es dient damit als erste Anlaufstelle, um die dezentral bereitgestellten Dienste innerhalb der Math-Net-Initiative aufzurufen. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste SIGMA (Gesamtindex), Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software betreut.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de), Winfried Neun (neun@zib.de), Wolfram Sperber (sperber@zib.de)

Informationsdienste des eLib-Servers

Auf dem vom ZIB betriebenen eLib-Server werden weiterhin verschiedene Informationsdienste im World Wide Web angeboten.

Der deutsche Spiegel der *Netlib* (<http://elib.zib.de/netlib/>) erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten. Zur effizienten Suche ist die *Netlib* mit Dublin Core Metadaten erschlossen.

Die ZIB-Suchmaschine (<http://www.zib.de/suche/>) zum Auffinden lokaler Dokumente, die über den ZIBIS-Server (<http://www.zib.de/>) zugänglich sind, ist mit dem Harvest-System realisiert worden und Teil des eLib-Services.

Die vorgenannten Dienste sind Bestandteile des hierarchisch organisierten Gesamtindex SIGMA des Math-Net (<http://www.math-net.de/>).

Eine umfangreiche Sammlung von Links auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World* (<http://www.math-net.de/links/>) angeboten, die ebenfalls zu den Kernbestandteilen des Math-Net gehören.

Das Opt-Net als elektronische Kommunikationsplattform für Optimierer besteht seit 1993 und ist mittlerweile vollständig auf LAMP-Technologie umgestellt.

Der ICM'98-Server informiert weiterhin über den *International Congress of Mathematicians* (<http://elib.zib.de/ICM98/>), der im Jahre 1998 in Berlin stattfand. Obwohl die Konferenz beendet ist, soll dieser Server zu Demonstrations- und Dokumentationszwecken weiterhin zugänglich bleiben. Zur langfristigen Archivierung existiert bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDG) ein Spiegel (<http://webdoc.gwdg.de/ICM98/>) des ICM'98-Servers.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

Server der International Mathematical Union (IMU)

Im Berichtszeitraum wurde der Web-Server der *International Mathematical Union* (<http://www.mathunion.org/>) an das ZIB verlagert und komplett überarbeitet. Neben den allgemeinen Informationen beinhaltet der IMU-Server auch die neuesten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU, wie der *International Commission of Mathematical Instruction (ICMI)*, der *Commission on Development and Exchange (CDE)* und der *International Commission on the History of Mathematics (ICHM)*. Das Erscheinungsbild ist bewusst im Stile der Math-Net-Seite gehalten. Im Zuge der Restrukturierung entstanden zwei neue Services: *IMU-Net*, und *EWDM*. *IMU-Net* ist der elektronische Rundbrief der IMU. Er dient der weltweiten Verbreitung von Empfehlungen und Entscheidungen der IMU. Die papiergebundene Version des World Directory of Mathematicians (WDM) ist aus Kostengründen vom Executive Committee der IMU eingestellt worden. Als Alternative dazu wurde der *Electronic World Directory of Mathematicians (EWDM)* entwickelt. Diese Datenbank-basierte Anwendung eines Directory-Services hat nach drei Monaten schon über sechshundert Einträge.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

6.7 KOBV-Dienste

Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale

- **KOBV-Suchmaschine**

Unter der WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> wird seit November 1999 die KOBV-Suchmaschine des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) bereitgestellt, die im Rahmen des KOBV-Projektes am ZIB entwickelt wurde. Im November 2001 wurde die zweite Version der KOBV-Suchmaschine mit erweiterten und verbesserten Web-Funktionalitäten zunächst zur Probe, Ende 2002 im Routinebetrieb eingesetzt. Oberfläche und Navigation dieser Version hat die KOBV-Zentrale verbessert und vereinfacht und im November 2002 in Betrieb genommen. Mit Hilfe der KOBV-Suchmaschine können Nutzer über das WWW in allen Universitäts- und Fachhochschulbibliotheken der Region, in der Staatsbibliothek zu Berlin, in vielen Spezialbibliotheken und – über die Region hinaus – in allen deutschen Bibliotheksverbänden und in großen internationalen Bibliotheken und Bibliotheksverbänden recherchieren. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig weiter ausgebaut und neue Bibliotheken werden in den Service eingebunden.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Portal – Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg**

Unter der WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> stellt die KOBV-Zentrale seit Dezember 2003 das KOBV-Portal, das regionale Portal der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken, bereit. Das KOBV-Portal wurde im Rahmen eines Projektes in den Jahren 2001–2003 am ZIB entwickelt. Es bietet den Zugriff auf viele Arten von Ressourcen und Medien: Online-Kataloge, Datenbanken, Linksammlungen, elektronische Zeitschriften, Volltexte, ... in Berlin und Brandenburg. In das KOBV-Portal sind die KOBV-Suchmaschine und der Verbundkatalog Film integriert. Der Internet-Service wird ständig ausgebaut und die Ressourcen weiterer Bibliotheken werden in das KOBV-Portal integriert.

Ansprechpartner: Andres Imhof (imhof@zib.de), Lavinia Hodoroaba (hodoroaba@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Christian Oesterheld (oesterheld@zib.de)

- **Verbundkatalog Film**

Über die WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> kann auch auf den Verbundkatalog Film zugegriffen werden. Die KOBV-Zentrale hat den virtuellen, fachbezogenen Verbundkatalog Film gemeinsam mit der Arbeitsgemeinschaft der Filmbibliotheken realisiert und stellt diesen Dienst seit August 2003 bereit. Der virtuelle Katalog bietet die parallele Suche nach Filmen (DVD/Videos) und Filmliteratur in deutschen Bibliotheken. Er ist noch im Aufbau.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de)

- **KOBV-Bibliothekenführer**

Unter der WWW-Adresse <http://search.kobv.de/bibinfo.html> stellt die KOBV-Zentrale seit Januar 2002 den KOBV-Bibliothekenführer bereit. Er ist als Gesamtverzeichnis der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken

konzipiert, an dem sich alle regionalen Bibliotheken beteiligen können. Jede Bibliothek hat einen Eintrag im Bibliothekenführer, den sie selbst über eine Web-Schnittstelle pflegen kann. Die Bibliotheken pflegen den Bibliothekenführer gemeinschaftlich; die Koordination liegt bei der KOBV-Zentrale. Mit Hilfe des KOBV-Bibliothekenführers können Nutzer nun im WWW auch nach regionalen Bibliotheken suchen. Dabei werden sie durch vielfältige Suchmöglichkeiten unterstützt: anklickbare Karte, Suche nach Stichwörtern aus dem Namen oder auch fachliche Suche nach Bibliotheken mit bestimmten Fächerschwerpunkten.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **Online-Fernleihe**

Die Online-Fernleihe, die Automatisierung der Fernleihe und die Umstellung auf einen Internet-Dienst, wird im Rahmen eines Projektes in der KOBV-Zentrale realisiert. Die KOBV-Zentrale betreibt dazu den Zentralen Fernleihserver (ZFL-Server), der von den fernleihrelevanten KOBV-Bibliotheken seit September 2003 im Routinebetrieb genutzt wird. Die Online-Fernleihe ist noch im Aufbau und wird um weitere Bibliotheken sowie die Komponente Endnutzer-Fernleihe erweitert.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Raluca Rascanu (rascanu@zib.de)

- **KOBV-Verbund (Index)**

Über die KOBV-Suchmaschine <http://digibib.kobv.de/> kann auch auf den KOBV-Verbund (Index) zugegriffen werden. Dieser sogenannte „Gemeinsame Index“ wurde – neben dem Zugriff über die Verteilte Suche – im Rahmen des KOBV-Projektes aufgebaut, um den schnellen und stabilen Zugriff auf die Bestände der Bibliotheken zu gewährleisten. Während der Laufzeit des Projektes wurden zunächst die Daten der großen, häufig frequentierten Bibliotheken in diesen Index eingespielt. Inzwischen baut die KOBV-Zentrale den Index kontinuierlich aus und entwickelt ihn weiter mit dem Ziel, dass die KOBV-Bibliotheken ihn in stärkerem Maße als bisher als Datenbasis für die Fremddatenübernahme nutzen können. Für die Aktualisierung setzt die KOBV-Zentrale verschiedene Verfahren ein: Online-Update, Update über Z39.50 und Offline-Update.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **Fremd- und Normdatenserver**

Zur gemeinsamen Nutzung durch die KOBV-Bibliotheken hat die KOBV-Zentrale den Fremd- und Normdatenserver aufgebaut. Er enthält die folgenden bibliographischen Daten: Deutsche Nationalbibliographie (DNB) seit 1986 (Reihen A, B, H, M, T und Neuerscheinungsdienst), sämtliche Reihen der Library of Congress (LOC) ab 1968, den Gesamtbestand des Verbundkataloges

maschinenlesbarer Katalogdaten deutscher Bibliotheken (Retro-VK) und die Titeldaten der Zeitschriftendatenbank. Darüber hinaus enthält er die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND), Schlagwortnormdatei (SWD). Die Daten werden – außer denen des Retro-VK, der abgeschlossen ist – wöchentlich aktualisiert. Die Fremd- und Normdaten werden von den KOBV-Bibliotheken über die interne Aleph-Schnittstelle oder über Z39.50 in das eigene lokale Bibliothekssystem kopiert und dort weiter verarbeitet. Aus lizenzrechtlichen Gründen ist die Nutzung nur für KOBV-Bibliotheken gestattet.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **Sequentiell Verteilte Suche**

Die Sequentiell Verteilte Suche wurde von der KOBV-Zentrale als Werkzeug für die Remote-Fremddatenübernahme über das Internet bereits während des KOBV-Projektes konzipiert und im Juni 2003 in Betrieb genommen. Sie ermöglicht Bibliotheken, die einen Z39.50-Client haben, per Knopfdruck die Übernahme strukturierter Datensätze aus einer entfernt liegenden Datenbank in das eigene Bibliothekssystem (Copy Cataloging). Darüber hinaus kann jede Bibliothek für das Absuchen der Fremddatenbanken eigene Profile definieren und sich damit – je nach Bedarf – spezifische virtuelle Fremddatenpools im Internet zusammenstellen. Wie ZACK II ist die Sequentiell Verteilte Suche damit ein Werkzeug zur Personalisierung der Fremddatenübernahme: Jede Bibliothek kann ihren eigenen, spezifischen „virtuellen Verbund“ zur schnellen und qualitativ hochwertigen Fremddatenübernahme aufbauen. Neben frei zugänglichen Datenbanken sind in die Sequentiell Verteilte Suche auch die vom KOBV lizenzierten Datenbanken des Fremd- und Normdatenservers eingebunden. Aus diesem Grund ist die Sequentiell Verteilte Suche nur für KOBV-Mitglieder zugänglich.

Ansprechpartner: Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-internes Gateway ZACK II**

Das KOBV-interne Gateway ZACK II, auch ein Werkzeug für die Remote-Fremddatenübernahme über das Internet, ist insbesondere für Bibliotheken gedacht, die keinen Z39.50-Client haben. Das im Rahmen einer Diplomarbeit während des KOBV-Projektes am ZIB entwickelte WWW-Z39.50-Gateway ZACK ermöglicht einen verteilten Zugriff auf Bibliotheksdatenbanken, die über das Z39.50 Protokoll ansprechbar sind. Als Rechercheergebnis werden strukturierte Datensätze geliefert, die per Knopfdruck in das jeweilige Bibliothekssystem übernommen werden können (Copy Cataloging). Die KOBV-Zentrale hat in 2003 einen externen Programmierauftrag vergeben für verschiedene Funktionserweiterungen, wie z. B. Warenkorb, Profilerstellung, kontextsensitive Hilfe, ISBD-Anzeige, Download von Bandformaten. ZACK II wurde im Dezember 2003 fertig gestellt und von den Bibliotheken zunächst im Testbetrieb eingesetzt. Neben frei zugänglichen Datenbanken sind in ZACK II auch die vom

KOBV lizenzierten Datenbanken des Fremd- und Normdatenservers eingebunden. Aus diesem Grund ist das KOBV-Interne Gateway ZACK II nur für KOBV-Mitglieder zugänglich.

Ansprechpartner: Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Hotline**

Unter der E-Mail-Adresse *kobv-zt@zib.de* hat die KOBV-Zentrale eine Hotline eingerichtet, an die sich Nutzer und Bibliothekare bei akuten Problemen mit den KOBV-Diensten bzw. bei allgemeinen Fragen zum KOBV oder zur KOBV-Suchmaschine wenden können. Die Mails unter der Sammeladresse *kobv-zt@zib.de* gehen an die gesamte KOBV-Zentrale, so dass auch bei Abwesenheit eines oder mehrerer Mitarbeiter und in Urlaubszeiten eine rasche Fehlerbehebung und eine schnelle und qualifizierte Beantwortung der Fragen garantiert ist.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Andres Imhof (imhof@zib.de), Lavinia Hodoroaba (hodoroaba@zib.de), Zara Kaneva (kaneva@zib.de), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Christian Oesterheld (oesterheld@zib.de), Raluca Rascanu (rascanu@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Informationsserver**

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de> wird das zentrale WWW-Informationsangebot zum Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) angeboten und ständig aktuell gehalten.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Daniel Baum

04.03.2003 *Einführung in Amira und AmiraMol*

Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik (zusammen mit Johannes Schmidt-Ehrenberg)

Wolfgang Baumann

21.01.2003 *HLRN - Aktuelle Möglichkeiten in Norddeutschland für High Performance Computing in CFD*

Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Philipp Beckmann

26.05.2003 *Detection of Shape Features by Skeletonization*

Tandem Workshop „Geometry, Numerics and Visualization“, Sauen, 26.-28. Mai

Werner Benger

22.07.2003 *Analysing Curved Spacetimes via Tensor Splats*

10th Marcel Grossmann Meeting, Rio de Janeiro

30.08.2003 *Numerische Relativitätstheorie*

Präsentation am “Tag der offenen Tür” des Max-Planck-Campus in Golm

Andreas Bley

10.04.2003 *A Polyhedral Approach to IP Network Optimization*

IMA Workshop on Network Management and Design, Institute for Mathematics and its Applications, University of Minnesota, Minneapolis, USA

19.08.2003 *The Minimum Congestion Shortest Path Routing Problem*

18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003),

Kopenhagen, Dänemark

- 03.09.2003** *A Lagrangian Approach for IP Network Optimization*
International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg, Heidelberg
- 28.10.2003** *A Lagrangian Approach for Integrated Network Design and Routing in IP Networks*
International Network Optimization Conference 2003, Evry/Paris, Frankreich
- 13.11.2003** *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*
8. Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik, Institut für Solare Energieversorgungstechnik e.V., Kassel

Ralf Borndörfer

- 17.02.2003** *Trassenallokation mit Fahrbändern*
WIP, TU Berlin
- 04.03.2003** *Strategische Planung im ÖPNV*
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 17.03.2003** *Dualität in der Linearen Programmierung*
WIP, TU Berlin
- 03.04.2003** *Strategische Planung im ÖPNV*
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, Berlin
- 29.04.2003** *Optimization in Public Transport*
Dänische Staatsbahn, Kopenhagen, Dänemark
- 09.05.2003** *Optimierung im ÖPNV*
Workshop DB Regio, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 22.05.2003** *Strategische Planung im ÖPNV*
Workshop mit den Berliner Verkehrsbetrieben, ZIB, Berlin
- 22.05.2003** *Vehicle and Duty Optimization*
Workshop mit IMTAC Technologies L.L.C., IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 24.06.2003** *Vehicle and Duty Scheduling in Public Transport*
Route 2003 - International Workshop on Vehicle Routing, Skodsborg, Dänemark
- 19.08.2003** *Solving Duty Scheduling Problems in Public Transit*
18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003), Kopenhagen, Dänemark

- 04.09.2003** *Solving Duty Scheduling Problems in Public Transit*
International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg
- 13.11.2003** *Umlauf- und Dienstplanoptimierung im ÖPNV*
GOR-Workshop 34 „Optimierung im öffentlichen Nahverkehr“, ZIB, Berlin
- 20.11.2003** *Der schnellste Weg zum Ziel - Mathematik in Transport und Verkehr*
3. Akademiewoche der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, Karl-Friedrich-Schinckel-Gymnasium, Neuruppin
- 03.12.2003** *Vehicle and Duty Optimization*
Workshop mit IVU UK Ltd., IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 10.12.2003** *Vehicle and Duty Optimization*
Workshop mit SNCF/Keolis, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

Manfred Brandt

- 05.09.2003** *On the Two-Class M/M/1 System under Preemptive Resume and Impatience of the Prioritized Customers*
International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg

Sven Burger

- 13.03.2003** *Ein schneller 2D/3D Finite-Elemente Solver für Banddiagramme Photonischer Kristalle*
1. Frühjahrstagung Photonische Kristalle, Düsseldorf (contributed talk)
- 30.03.2003** *Atoms and Photons in Periodic Potentials*
Review meeting of the European Network ‘Cold Quantum Gases’, Camogli, I (invited talk)
- 16.07.2003** *A fast and efficient Finite-Element Solver for 2D and 3D Photonic Band-Gap Problems*
IEEE Summer Topicals 2003, Vancouver (contributed talk)

Hubert Busch

- 31.03.2004** *The Distributed HLRN System - Challenges and Issues from a Storage Point of View*
Vortrag anlässlich des 2nd hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems, HLRS Stuttgart

Frank Cordes

- 10.03.2003** *3D Strukturmodellierung von RNA Molekülen*
1. RNA Symposium , RiNA, Berlin

- 01.04.2003** *Conformation Databases for Virtual Screening*
Statusseminar BCB, BioTOP, Investitionsbank Berlin
- 02.07.2003** *Avoid the critical slowing down – identify metastability before you get trapped*
SciCade Trondheim, Norway, invited minisymposium
- 06.11.2003** *Conformation Dynamics and Virtual Screening*
1. Meeting of the BCB Scientific Advisory Board, Berlin

Wolfgang Dalitz

- 11.03.2003** *Sharing Knowledge in Mathematics: Math-Net, Math-Net Pages and the Math-Net Navigator*
9. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, Osnabrück

Peter Deuffhard

- 22.01.2003** *Das Lächeln des Mathematikers – Partielle Differentialgleichungen in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie*
Kolloquium, Ruhr-Universität Bochum
- 18.02.2003** *Affine Invariant Newton codes for Discretized PDEs*
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 10.03.2003** *Computational Drug Design in the Virtual Lab*
Invited Talk, International Conference on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam
- 04.04.2003** *The DFG-Research Center in Berlin*
Fulbright Seminar for U.S. Administrator in International Education, German-American Fulbright Commission, Berlin
- 04.06.2003** *The Smile of the Mathematicians*
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 09.07.2003** *New Math for New Drugs Against New Diseases*
Invited Keynote Talk, ICIAM 2003, Sydney, Australia
- 16.07.2003** *New Math for New Drugs Against New Diseases*
Invited Talk, Conference on Modelling Cellular Function, Auckland, New Zealand
- 23.10.2003** *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*
Conference on Inverse Problems, Institute for Pure and Applied Mathematics (IPAM), UCLA
- 29.10.2003** *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*
Department of Mathematics, University of Houston, Texas

12.11.2003 *Patientenspezifische mathematische Optimierung in der Krebstherapie
Hyperthermie*

Dresdner Mathematisches Seminar, TU Dresden

18.11.2003 *From Molecular Dynamics to Conformation Dynamics in Computational
Drug Design*

INRIA Colloquium, Rocquencourt

Elke Durek

25.03.2003 *KOBV-Informationportal*

2. KOBV-Forum „Neue Dienste - Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

Klaus Ehrhardt

27.06.2003 *Betriebskostenminimierung für Erdgastransportnetze*

BMBF-Workshop Bad Vilbel

Andreas Eisenblätter

11.03.2003 *Demand-Driven UMTS Radio Network Dimensioning*

High Performance Scientific Computing Conference, Hanoi, Vietnam

07.04.2003 *UMTS Radio Network Planning*

IMA Workshop on Network Management and Design, Minneapolis, USA

22.08.2003 *Challenges in UMTS Radio Network Planning*

18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003),
Kopenhagen, Dänemark

03.09.2003 *Models for UMTS Radio Network Planning*

International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg

21.11.2003 *MOMENTUM Public Data Scenarios for Radio Network Planning and
Simulation*

3rd Workshop on “Optimization and Simulation in Telecommunication Net-
works”, Rom, Italien

Hildegard Franck

25.03.2003 *Datenformate und Konvertierung*

2. KOBV-Forum: „Neue Dienste - Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

Hans-Hermann Frese

05.08.2002 *Resource Scheduling and Workload Management for the HLRN Multi Clu-
ster*

ScicomP 8, Minneapolis, Minnesota, USA

Tobias Gänzler

28.05.2003 *Interior Point Methods: An Introduction*

DFG FZT86 Tandem Workshop on „Geometry, Numerics and Visualization“,
Sauen/Brandenburg

Hans-Florian Geerdes

30.07.2003 *Mathematical Programming Techniques for the Potential of Relaying in Wireless LANs*

Heinz-Nixdorf-Institut, Paderborn

21.08.2003 *The Potential of Relaying in Cellular Wireless Computer Networks*

18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003),
Kopenhagen, Dänemark

03.09.2003 *The Potential of Relaying in Cellular Wireless Computer Networks*

International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg

18.09.2003 *The Potential of Relaying in Cellular Wireless Computer Networks*

Studentenkonferenz Mathematik 2003 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung,
Rostock

26.09.2003 *MOMENTUM Public Data Scenarios for UMTS Network Planning and Simulation and their XML Format*

COST 273, 8th MCM, Prag, Tschechische Republik

28.10.2003 *The Potential of Relaying in Cellular Networks*

International Network Optimization Conference 2003, Evry-Paris, Frankreich

23.11.2003 *MOMENTUM Public Data Scenarios for Radio Network Planning and Simulation*

TU Berlin, Fachgebiet Telekommunikationsnetze

Evgeny Gladilin

17.02.2003 *Realistic prediction of individual facial emotion expressions for craniofacial surgery simulations*

SPIE Medical Imaging, San Diego, USA (contributed talk)

20.02.2003 *Physically Based Modeling of Soft Tissue for Craniofacial Surgery Simulations*

Special NYU/CAT Colloquium, New York, USA

26.05.2003 *Biomechanical Modeling of Deformable Soft Tissues*

DFG FZT86 Tandem Workshop on „Geometry, Numerics and Visualization“,
Sauen, Brandenburg (contributed talk)

25.06.2003 *On constitutive modeling of soft tissue for the long term prediction of*

cranio-maxillofacial surgery outcome

Computer Assisted Radiology and Surgery CARS, London, UK (contributed talk)

Bernd Gnädig

16.12.2003 *Betrieboptimierung der Trinkwasserversorgung Berlins*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

Martin Grötschel

13.01.2003 *Von der Schönheit und dem Nutzen der Mathematik*
Podiumsdiskussion, InfoRadio Berlin-Brandenburg, Berlin

20.02.2003 *Mathematische Modelle zur Lösung von (ganz profanen) Anwendungsproblemen*
Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin

13.03.2003 *Using Polynomial Inequalities in Combinatorial Optimization*
Conference on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

06.04.2003 *Mathematical Challenges in Telecommunication*
IMA-Tutorial „Network Management and Design“, Minneapolis, USA

10.04.2003 *The Future Publication Landscape Seen from a Mathematician's Point of View*
University of Minnesota Libraries and School of Mathematics, Minneapolis, USA

17.04.2003 *Modellierung und Simulation und was Mathematiker darunter verstehen*
Ringvorlesung 2003 „Der Modellbegriff in Natur- und Ingenieurwissenschaften“ des Graduiertenkollegs „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“, TU Berlin

05.05.2003 *Cardinality homogeneous set systems*
European Graduate Program „Combinatorics, Geometry, and Computation“, ZIB Berlin

19.05.2003 *Anforderungen an die wissenschaftliche Informationsversorgung*
Kolloquium zur Einweihung des Erwin-Schrödinger-Zentrums, HU Berlin

10.06.2003 *Colouring Radio Waves*
Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig

23.06.2003 *Mono- und multikriterielle Optimierung: Welche Ansprüche kann die Mathematik befriedigen?*
Workshop der BBAW-Studiengruppe „Strukturbildung und Innovation: Transdisziplinäre Aspekte, Analyse und Optimierung“, Berlin

05.09.2003 *Mathematik als Hilfswissenschaft für Hilfsdienste*
2. BERLINER MNU-KONGRESS, Berlin

- 08.09.2003** *Combinatorics and Telecommunication*
Eurocomb'03 – European Conference on Combinatorics, Graph Theory and Applications, Prag, Tschechische Republik
- 02.10.2003** *Der ÖPNV unter der mathematischen Lupe: Gibt es noch Optimierungspotentiale?*
IVU-Konferenz, Berlin
- 22.10.2003** *Electronic Information and Communication and the International Mathematical Union*
„Open Access Conference“ der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin
- 30.10.2003** *Geistiges Eigentum in der Mathematik: Die (gegenwärtige) Position der International Mathematical Union*
IuK-Herbsttagung, Bad Honnef
- 05.11.2003** *Der beste Weg zum Ziel – Mathematik und Transportoptimierung*
Vortragsreihe „Faszination Mathematik“ im Heinz Nixdorf MuseumsForum, Paderborn
- 27.11.2003** *Über die Zukunft der wissenschaftlichen Informationsversorgung: Wie sollen wir mit unseren Daten und Ergebnissen umgehen?*
Kolloquium am Leibniz-Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF) e.V., Müncheberg
- 02.12.2003** *Optimierung in der Telekommunikation*
Universität Hamburg
- 04.12.2003** *Mathematische Optimierung und öffentlicher Nahverkehr*
Ruhr-Universität Bochum
- 12.12.2003** *Das Telota-Projekt*
Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin
- 18.12.2003** *MINT 300 – Warum braucht Deutschland mehr MINT-Nachwuchs?*
Podiumsdiskussion, Haus der Deutschen Wirtschaft, Berlin

Hans-Christian Hege

- 29.01.2003** *Amira – ein Tool für die Neurobiologie*
Zwischenbegutachtung des BMBF-Forschungsverbundes “Virtual Brain”, (‘Standardgehirn’, Phase II), Institut für Neurobiologie und Genetik, Universität Würzburg
- 17.02.2003** *Introduction to Visual Data Analysis*
Programa de Doctorado em Inform’atica y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona
- 18.02.2003** *Architecture of Virtual Laboratories*
Programa de Doctorado em Inform’atica y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona

- 19.02.2003** *Real Time Computer Graphis*
Programa de Doctorado em Inform'atica y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona
- 20.02.2003** *Visualization of Scalar Fields*
Programa de Doctorado em Inform'atica y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona
- 21.02.2003** *Visualization of Vector Fields*
Programa de Doctorado em Inform'atica y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona
- 13.03.2003** *Interaktive computergrafische Darstellung von komplexen Landschaften*
Statustagung DBU-Verbundprojekt „Lenné3D – Landschaften sehen, verstehen, gestalten“, Hasso-Plattner-Institut Potsdam (zusammen mit Liviu Coconu)
- 17.03.2003** *Visualization in Biomedicine: Methods and Applications*
Summer School “Jacques Louis Lions” – Multidisciplinary Methods for Analysis, Optimization and Control of Complex Systems, MACSI-net, Montecatini, Italy, March 17-22
- 20.03.2003** *Visualization in Engineering: Methods and Applications*
Summer School “Jacques Louis Lions” – Multidisciplinary Methods for Analysis, Optimization and Control of Complex Systems, MACSI-net, Montecatini, Italy, March 17-22
- 04.04.2003** *Präsentation wissenschaftlicher Inhalte mit moderner Planetariumstechnik*
Carl Zeiss Jena, Live-Präsentation mittels AMIRAVR und digitaler laserbasierter Ganzkuppel-Projektion (zusammen mit Olaf Etzmuß)
- 23.04.2003** *Creation and Visualization of 3D Anatomical Models*
3D Modelling 2003, Paris, 23.-24. April
- 09.05.2003** *Von 3D-Bilddaten zu geometrischen 3D-Modellen*
PTB - Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin
- 15.05.2003** *From 3D Image Data to 3D Geometrical Models*
Universität Duisburg, Fachbereich Mathematik, Fachgebiet “Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen”
- 26.05.2003** *Creating 3D Geometrical Models from 3D Image Data*
Tandem Workshop “Geometry, Numerics and Visualization”, Sauen, 26.–28. Mai
- 06.06.2003** *Extracting and Visualizing Essential Molecular Shapes*
Workshop “Scientific Visualization: Extracting Information and Knowledge from Scientific Data Sets”, Dagstuhl, June 1–6, 2003
- 17.06.2003** *Scientific Visualization: from Atoms to Galaxies*
Géométrie et Visualisation, Maubeuge, Frankreich

04.07.2003 *Hierarchical Volume Rendering*

Workshop “Hierarchical Methods in Computer Graphics”, Dagstuhl, June 1–6, 2003

10.09.2003 *Biomedical Visualization*

Präsentation für IBM Life Sciences, ZIB (zusammen mit Daniel Baum)

04.10.2003 *Perceptually Effective 3D Visualization of Complex Data*

2003 Computer Graphics and Visualization Festa, Nikkei Science, Tokyo, Japan (Keynote Lecture)

13.11.2003 *Perzeptuell effektive Visualisierung von wissenschaftlichen Daten*

Universität Paderborn, PC²-Kolloquium

24.11.2003 *Visual Analysis of Fluid Flow and Engineering Data*

EU-Projekttreffen “Virtual Basin”, Amsterdam

Lavinia Hodoroba**25.03.2003** *KOBV-Informationportal*

2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“ im ZIB

06.08.2003 *The KOBV Information Portal*

IFLA 2003 - Bibliotheksbesuche / Fachbesichtigungen „Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – KOBV“, ZIB, Berlin

Andres Imhof**06.08.2003** *The KOBV Information Portal*

IFLA 2003 - Bibliotheksbesuche/Fachbesichtigungen „Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg - KOBV“, ZIB, Berlin

13.11.2003 *Das KOBV-Informationportal – ein regionales Portal für Berlin-Brandenburg*

7. InetBib-Tagung vom 12.-14.11.2003, Frankfurt/Main

Ralf Kähler**18.03.2003** *Präsentation: GriKSL-Kollision schwarzer Löcher*

CeBIT-Future Talk, DFN

Bernd Kallies**23./24.06.2003** *HLRNDoc - ein offenes Dokumentationssystem für ein virtuelles Kompetenznetzwerk*

4. ZKI and AMH Web-Admin-Workshop, HU Berlin

31.10.2003 *Molecular Dynamics: Introduction and Data Analysis*

1st Berlin Molecular Dynamics Meeting, ZIB

Uta Kaminsky

15.01.2003 *Das Friedrich-Althoff-Konsortium und die Arbeitsgemeinschaft der Konsortien in Deutschland, Österreich und der Schweiz*

Vortrag im Pro-Seminar „Zentrale Dienstleistungen im deutschen Bibliothekswesen“ (Prof. Dr. R. Funk) am Institut für Bibliothekswissenschaft, HU Berlin

Gunnar Klau

06.02.2003 *Lokale Suche und Power-Assignment bei der Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle*

Workshop „Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle“, ZIB, Berlin

13.05.2003 *Prize-Collecting Steiner Trees: Theory & Practice*

eingeladener Vortrag bei den Mitsubishi Electric Research Laboratories, Cambridge, MA, U.S.A.

05.06.2003 *The Fractional Prize-Collecting Steiner Trees Problem on Trees*

Freie Universität Berlin, Fachbereich Informatik

Arie M.C.A. Koster

13.02.2003 *Optimization of Telecommunication Networks at ZIB*

SAGA workshop NoE proposal, Sophia-Antipolis, Frankreich

13.05.2003 *UMTS mobile telecommunication network design by mathematical programming*

Gastvortrag Technische Universität Delft, Niederlande

17.06.2003 *The Potential of Relaying in Cellular Wireless Computer Networks*

International Workshop on Interconnection Networks (IWIN 2003), Umeå, Schweden

26.06.2003 *Graph Reduction Techniques for Treewidth*

Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

21.08.2003 *Lightpath coloring in all-optical networks*

18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003), Kopenhagen, Dänemark

25.09.2003 *Graph Coloring in Optical Networks*

Dagstuhl-Seminar „Graph Coloring“, Schloss Dagstuhl

23.–24.10.2003 *Forschungs-Gastaufenthalt zum Thema „Treewidth“*

Institute of Information & Computing Science, Universität Utrecht, Niederlande

21.11.2003 *Design of Survivable Optical Networks by Demand-wise Shared Protection*

3rd Workshop on „Optimization and Simulation in Telecommunication Net-

works“, Rom, Italien

- 04.12.2003** *Lower bounds for Treewidth – Computational comparison*
5th Meeting NWO-Projekt „Treewidth and Combinatorial Optimization“, Universität Maastricht, Niederlande

Sven Krumke

- 18.01.2003** *Online Optimierung*
Gastvortrag Technische Universität Kaiserslautern
- 21.01.2003** *Algorithmen und Analyse für Online-Probleme*
Gastvortrag an der RWTH Aachen
- 05.04.2003** *Scheduling a Server on a Caterpillar Network*
Sixth Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems, Aussois, Frankreich
- 05.06.2003** *Algorithmen für die Gelben Engel*
Intergraph Anwendertreffen und Workshop, Erfurt
- 13.09.2003** *Tausendfüßler, Zufallsirrfahrten und Aufzüge*
Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, Universität Klagenfurt, Österreich

Monika Kuberek

- 11.02.2003** *Informationsinfrastruktur in der Region – Neue Entwicklungen im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*
Berliner Bibliothekswissenschaftliches Kolloquium am Institut für Bibliothekswissenschaft der Humboldt-Universität, Berlin
- 25.02.2003** *Dienste für Nutzer und Bibliothekare auf einer innovativen Plattform - Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*
EKZ-Fachkonferenz der Staatlichen Büchereistellen „Digitales, Virtuelles, Netze und Portale - EDV-Seminar für Fachstellenbibliothekare“ vom 25.-27.02.2003, Reutlingen
- 07.03.2003** *Projekt KOBV-Informationsportal*
Workshop „Digitale Bibliotheken – national, regional, lokal“ des BMBF-Projektes Vascoda der AG Informationsverbände vom 06.-07.03.2003, Frankfurt am Main
- 25.03.2003** *Hosting-Service für Virtuelle Fachverbände*
2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin
- 25.03.2003** *Neue Oberfläche / Navigation / Personalisierung - Technische Features der KOBV-Suchmaschine*
2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB Berlin

- 25.03.2003** *Online-Fernleihe im KOBV - Aktueller Stand/Planungen*
2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin
- 20.05.2003** *Virtueller Fachverbund Film - Der Hosting-Service des KOBV für Virtuelle Fachverbände*
11. Tagung der Arbeitsgemeinschaft Filmbibliotheken, Braunschweig
- 30.06.2003** *Online-Fernleihe im KOBV – Überblick*
KOBV-Workshop „Online-Fernleihe“, ZIB, Berlin
- 30.06.2003** *Nachrecherche & Leitweg-Festlegung, Verfügbarkeitsrecherche*
KOBV-Workshop „Online-Fernleihe“, ZIB, Berlin
- 18.09.2003** *Ex Libris-Anwendungen in der KOBV-Zentrale*
5. Aleph-DACH-Treffen vom 18.-19. September 2003, Wien
- 13.11.2003** *Die Internet-Dienste des KOBV*
7. InetBib-Tagung vom 12.-14. November 2003, Frankfurt am Main

Hans Lamecker

- 23.01.2003** *Automatic Segmentation of the Liver for the Preoperative Planning of Resections*
MMVR11 Konferenz, Newport Beach, Kalifornien, 22.-25. Januar
- 25.01.2003** *From Image Data to Three-Dimensional Models - Case Studies on the Impact of 3D Patient Models*
MMVR11 Konferenz, Newport Beach, Kalifornien, 22.-25. Januar
- 11.03.2003** *Erzeugung statistischer 3D-Formmodelle zur Segmentierung medizinischer Bilddaten*
BVM Workshop, Erlangen, 9.-11. März
- 11.03.2003** *Ein Softwarepaket für die modellbasierte Segmentierung anatomischer Strukturen*
BVM Workshop, Erlangen, 9.-11. März
- 26.05.2003** *3D Statistical Shape Models for Medical Image Segmentation*
Tandem Workshop „Geometry, Numerics and Visualization“, Sauen, 26.-28. Mai
- 12.06.2003** *Von Bilddaten zu geometrischen Modellen*
Treffen des Arbeitskreises Medizinische Visualisierung, Magdeburg, 12. Juni

Monika Lill

- 25.03.2003** *KOBV-Suchmaschine, Technische Features: MetaLib und Clustering*
2. KOBV-Forum: „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

Stefan Litsche**25.03.2003** *KOBV-Informationportal*

2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

Stefan Lohrum**09.01.2003** *Systemmonitor für Aleph/MetaLib*

4. Aleph-DACH-Anwendertreffen, 9.-10.01.2003, Köln

25.03.2003 *Online-Fernleihe im KOBV – Kommunikation im Fernleihserver*

2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

25.03.2003 *KOBV-Suchmaschine – MetaLib-XML-Schnittstelle*

2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin

30.06.2003 *Kommunikation im Fernleihserver*

KOBV-Workshop „Online-Fernleihe“, ZIB, Berlin

06.08.2003 *KOBV – The cooperative library network of Berlin and Brandenburg*

IFLA 2003 - Bibliotheksbesuche/Fachbesichtigungen „Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – KOBV“, ZIB, Berlin

18.09.2003 *Grundsätzliches zu Z39.50: Was das Protokoll leistet und was nicht*

Z39.50-Workshop für SISIS-Anwender im KOBV, ZIB, Berlin

Joachim Lügger**17.01.2003** *Vom Verteilten Dokumentenspeicher zum Verteilten Zeitschriftenserver und zurück*

Workshop „Verteilter Zeitschriftenserver, Verteilter Dokumentenspeicher und Internet-Suchmaschinen“, ZIB, Berlin

23.01.2003 *Verteilter Zeitschriftenserver – Einführung und Überblick*

3. Treffen der Arbeitsgruppe „Verteilter Zeitschriftenserver“, Universität Frankfurt a. M.

23.01.2003 *Verteilter Objektspeicher des KOBV*

3. Treffen der Arbeitsgruppe „Verteilter Zeitschriftenserver“, Universität Frankfurt a. M.

03.03.2003 *Verteilter Zeitschriftenserver, Einführung und Überblick*

Treffen der Arbeitsgemeinschaft Deutscher, Österreichischer und Schweizer Konsortien (GASCO), Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt a. M.

06.03.2003 *Verteilter Dokumentenspeicher, Einführung und Überblick*

Workshop „Digitale Bibliotheken – national, regional, lokal“ des BMBF-Projektes Vascoda der AG Informationsverbände vom 06.-07.03.2003, Frankfurt am Main

- 25.03.2003** *Verteilter Dokumentenspeicher als kooperativer Objektspeicher unter Gesichtspunkten der Dauerhaftigkeit*
KOBV-Forum, ZIB, Berlin
- 26.03.2003** *Verteilter Zeitschriftenserver, Stand der Diskussion - März 2003*
Treffen der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme, ZIB, Berlin
- 31.07.2003** *Nahtlose Navigation und Linking: Das Konzept des Meta-Linkens*
Treffen der AG „Verteilte Zugriffskontrolle“ der AG „Verteilter Zeitschriftenserver“, Bayerische Staatsbibliothek, München
- 16.09.2003** *Verteilter Dokumentenserver, Ziele, Struktur, Schwerpunkte*
1. gemeinsame Sitzung der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme und des vascoda-Steuerungsgremiums, TIB Hannover
- 06.10.2003** *Offene Navigation und Suchmaschinen in Verbänden, Konsortien und den Wissenschaften*
Workshop des Kompetenznetzwerkes „Neue Dienste, Standards und Metadaten“, DDB, Frankfurt a. M.
- 14.10.2003** *Integration des Verteilten Dokumentenservers (VDS) in vascoda – Anträge des VDS*
1. Sitzung des erweiterten vascoda-Steuerungsgremiums, TIB, Hannover

Sascha G. Lukac

- 30.01.2003** *Trassenvergabe bei der Eisenbahn*
WIP, TU Berlin
- 03.03.2003** *Das MZZ-Modell*
WIP, TU Berlin
- 01.08.2003** *Das MZZ-Modell der Trassenvergabe*
WIP, TU Berlin
- 15.12.2003** *Trassenbörse im Bahnverkehr*
DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Netzwerktag 2003, TU Berlin

Frank Lutz

- 07.04.2003** *Wreath products of polytopes and spheres*
Workshop „Topological and Geometric Combinatorics“, Oberwolfach
- 18.09.2003** *Kleine Beispiele nicht-konstruierbarer Bälle und Sphären*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Rostock
- 14.11.2003** *Graph colorings and sphere bundles*
Kolloquium über Kombinatorik, Magdeburg

Alexander Maye**16.10.2003** *Image Registration*

Neurobiologisches Praktikum, FU Berlin

5.11.2003 *On the representational capabilities of neuronal oscillations*

International School on Neural Nets „E.R. Caianiello“, 8th Course: Computational Neuroscience: Cortical Dynamic, Sicily

4.12.2003 *Neuronal Synchrony: Experiments and Models*

Biomathematisches Kolloquium, Universität Bonn

Winfried Neun**22.05.2003** *Parallel Symbolic Computing on the Brock Beowulf Computer Cluster*

Brock University, St. Catharines, Kanada

17.09.2003 *Harvesting Webpages that contain Mathematical Information*

Konferenz SINN03, Universität Oldenburg

Sebastian Orlowski**03.12.2003** *A multilayer planning model*

Lehrstuhl für Kommunikationsnetze, TU München

Philip Paar**30.01.2003** *Lenné3D – ein Verbundprojekt zur Entwicklung und Erprobung eines interaktiven Visualisierungssystems für die Landschaftsplanung*

Kolloquium am Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, ZALF Müncheberg

13.03.2003 *Das Verbundvorhaben Lenné3D*

Statusseminar Lenné3D, HPI Potsdam

15.05.2003 *The Making of a New Landscape Visualization System: From Requirements Analysis and Feasibility Survey towards Prototyping*

4th International Conference on New Trends in Landscape Architecture, Hochschule Anhalt, Dessau

25.03.2003 *Interaktive Landschaftsvisualisierung aus Kartensicht und Spaziergängerperspektive*

Beirat Interaktiver Landschaftsplan, Universität Hannover

12.08.2003 *Lenné3D – A project on GIS data-based 3D landscape visualization*

Taiwan Delegation, ZALF Müncheberg

13.10.2003 *GIS-datengestützte 3D-Landschaftsvisualisierung*

Institut für Kartographie und Geoinformation, Universität Bonn

7.11.2003 *Das Landschaftsbild per Computergrafik*

Dresdener Planergespräche, Die Berücksichtigung der Landschaftsgestaltqualitäten in der örtlichen Landschaftsplanung, in Umweltverträglichkeitsstudien und in Landschaftspflegerischen Begleitplänen Technische Universität Dresden

20.11.2003 *Einsatz von Lenné3D in Planungs- und Beteiligungsprozessen*

Expertenworkshop Lenné3D, ZALF Müncheberg

21.11.2003 *Das Forschungsprojekt Lenné3D - interaktive Landschaftsmodellierung und -visualisierung*

Gastvorlesung Ökologische Karten, Technische Universität Berlin, Institut für Ökologie (zusammen mit Liviu Coconu und Wieland Röhricht)

12.12.2003 *Landscape Visualization focusing on vegetation, GIS data and interactive exploration*

Conference on Tools for Community Design and Decision Making, Working Session V: Information Technology in Action, San Francisco

15.12.2003 *Landscape Visualization focusing on vegetation, GIS data and interactive exploration*

ESRI Environmental Systems Research Institute Inc., Redlands

Marc Pfetsch**30.01.2003** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*

Workshop über Verkehrsprojekte, ZIB, Berlin

04.03.2003 *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*

Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

11.03.2003 *The Maximum Feasible Subsystem Problem and Polyhedra*

7th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

03.04.2003 *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*

Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, Berlin

22.05.2003 *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*

Workshop mit den Berliner Verkehrsbetrieben BVG, ZIB, Berlin

22.08.2003 *The Maximum Feasible Subsystem Problem and Related Polyhedra*

18th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2003), Kopenhagen, Dänemark

05.09.2003 *Strategic Planning in Public Transport*

International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg

13.11.2003 *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*

GOR-Workshop 34 „Optimierung im öffentlichen Nahverkehr“, ZIB, Berlin

- 20.11.2003** *Mathematik löst Optimierungsprobleme*
3. Akademiewoche der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, Marie-Curie-Gymnasium, Ludwigsfelde
- 10.12.2003** *Diskrete Mathematik und Optimierung im Verkehr*
Gastvortrag, FH Zittau/Görlitz, Görlitz
- 12.12.2003** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, Lufthansa Systems AG, Berlin
- 15.12.2003** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*
DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Netzwerktag 2003, TU Berlin
- 16.12.2003** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

Diana Poensgen

- 04.02.2003** *Dynamic Routing Algorithms in Transparent Optical Networks*
7th IFIP Working Conference on Optical Network Design and Modelling, Budapest, Ungarn
- 11.07.2003** *Minimizing the Maximum Flow Time in the Online Dial-a-Ride Problem*
31. Berliner Algorithmen Tag, Humboldt-Universität zu Berlin
- 26.08.2003** *Aspekte der Online-Optimierung*
Promotionsvortrag, Technische Universität Berlin

Steffen Prohaska

- 13.01.2003** *2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity*
HEALTHY Project Workshop (European Commission FP6), ESA-ESTEC, Noordwijk, Netherlands
- 28.03.2003** *Interactive Visualization to Support Quantification of Bone Biopsies*
2nd European Congress „Achievements in Space Medicine into Health Care Practice and Industry“, Berlin-Adlershof
- 21.05.2003** *A Virtual Laboratory for Assessment of Bone Biopsies*
14th IAA Humans in Space Symposium, Banff, Alberta, Canada
- 27.10.2003** *Programming for Large Data Input*
Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“, Universität Århus

Jörg Rambau

- 20.02.2003** *Triangulations and Oriented Matroids*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 11.03.2003** *Triangulations and Oriented Matroids I*
Tutorial, Barbados Undercurrent Workshop on Polytopes, Games & Matroids
- 12.03.2003** *Triangulations and Oriented Matroids II*
Tutorial, Barbados Undercurrent Workshop on Polytopes, Games & Matroids
- 13.03.2003** *Triangulations and Oriented Matroids III*
Tutorial, Barbados Undercurrent Workshop on Polytopes, Games & Matroids
- 16.05.2003** *Der Flug der gelben Engel – Automatisches Dispatchen von ADAC-Fahrzeugen in Echtzeit*
Sonderkolloquium „Wirtschaftsmathematik“, Universität Bayreuth
- 10.06.2003** *Tourenplanung für Servicetechniker*
Abschlusspräsentation I einer Studie für Hermes Technischer Kundendienst, Hamburg
- 04.07.2003** *Die Abteilung Optimierung des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin*
Präsentation für Studierende des Kurses „Algorithmische Diskrete Mathematik“ der TU Berlin, ZIB, Berlin
- 21.07.–30.09.2003** *General Member im Special Semester „Discrete and Computational Geometry“*
Mathematical Sciences Research Institute (MSRI), Berkeley, USA
- 22.09.2003** *On a generalization of Schönhardt’s polyhedron*
Working-Group-Vortrag im Special Semester „Discrete and Computational Geometry“, MSRI, Berkeley, USA
- 22.10.2003** *Tourenplanung für Servicetechniker*
Abschlusspräsentation II einer Studie für Hermes Technischer Kundendienst, Hamburg
- 31.10.2003** *Die Hirsch-Vermutung für 0-1-Polytope*
Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Göttingen
- 31.10.2003** *Der Flug der gelben Engel – Automatisches Dispatchen von ADAC-Fahrzeugen in Echtzeit*
Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Göttingen
- 09.12.2003** *Kombinatorische Methoden in Geometrie, Topologie und Optimierung*
Fachbereich Mathematik, TU Darmstadt

Alexander Reinefeld

- 10.02.2003** *Managing Distributed Data in the Grid: Case Studies in Drug Design and Particle Physics*
1st European Grid Symposium for Life Sciences, InfoTechPharma 2003, London
- 12.02.2003** *The Grid - Status and Perspectives*
ENES Workshop, Antwerpen
- 05.06.2003** *Grid Computing - Status and Perspectives. Ringvorlesung „Schwerpunkte der Informatik“*
Humboldt-Universität zu Berlin
- 17.07.2003** *Towards a German Grid/eScience Program - Grid Activities in Germany*
Workshop on ERA and Grid Research, Brüssel
- 11.09.2003** *Distributed Data Management in the Grid*
VLDB 2003, Berlin
- 25.09.2003** *Aktuelle technische Fragestellungen bei der Grid-Entwicklung*
Konferenz „E-Science: Die technische Infrastruktur“, Wissenschaftszentrum Bonn

Stefan Röhl

- 26.06.2003** *Management verteilter Lager: Transportorganisation bei stochastischer Nachfrage*
BMBF Workshop Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft, Bad Vilbel

Beate Rusch

- 25.03.2003** *Optimierung der Fremddatenübernahme: Maßnahmen, Aktueller Stand, Planungen*
2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin
- 25.03.2003** *KOBV-Suchmaschine, Technische Features: Die sequentiell verteilte Suche*
2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, ZIB, Berlin
- 12.05.2003** *ZACK und seine Anwender im KOBV*
ZACK-Workshop, ZIB, Berlin
- 06.08.2003** *Services for the library community in Berlin-Brandenburg*
IFLA 2003 - Bibliotheksbesuche / Fachbesichtigungen “Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – KOBV“, ZIB, Berlin
- 18.09.2003** *Grundsätzliches zu Z39.50: Was das Protokoll leistet und was nicht*
Z39.50-Workshop für SISIS-Anwender im KOBV, ZIB, Berlin

Achim Schädle

- 24.06.2003** *A fast convolution algorithm for non-reflecting boundary conditions*
20th Biennial Conference on Numerical Analysis, University of Dundee (contributed talk)

Florian Schintke

- 16.05.2003** *Grid Computing with Peer-to-Peer Techniques. Tag der Informatik*
Humboldt-Universität zu Berlin

Frank Schmidt

- 24.06.2003** *Solving Helmholtz scattering problems based on the pole condition concept*
MAFELAP 2003, invited minisymposium, Brunel University, GB
- 27.06.2003** *Die Laplace-Domain-Methode: Eine Alternative zu Randintegral-Methoden?*
Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing, FU Berlin
- 27.01.2003** *Adaptive Numerical Methods for Problems of Integrated Optics*
Photonics West, USA, invited talk
- 22.07.2003** *Numerical Methods to Realize the Pole Condition Concept*
15th International Conference on Domain Decomposition Methods, FU Berlin, invited minisymposium

Johannes Schmidt-Ehrenberg

- 04.03.2003** *Einführung in Amira und AmiraMol*
Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik (zusammen mit Daniel Baum)
- 06.11.2003** *Identification and Visualization of Conformations (Poster)*
1. Meeting of the BCB Scientific Advisory Board, Berlin

Wolfram Sperber

- 18.02.2003** *Using Metadata in Math-Net*
Mathematical Knowledge Management 2003, Bertinoro, Italy
- 11.03.2003** *Math&Industry: Sharing Knowledge between Mathematics and Industry*
9. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland Osnabrück
- 15.10.2003** *Math&Industry – wie präsentiert man Projekte der angewandten Mathematik im Web*
Berliner XML-Tage 2003, Berlin

Detlev Stalling

- 3.02.2003** *Visuelle Datenanalyse mit amira - vom Desktop in die VR*
Workshop „Der Einsatz von Virtual Reality in der Simulation“, 3Dims, Frankfurt a.M.

Marc Steinbach

- 11.02.2003** *Dynamische Optimierung der Lastverteilung im Gasnetz*
Darmstädter Seminar zur Optimierung, TU Darmstadt
- 28.03.2003** *Kostenminimaler operativer Betrieb von Gasnetzen*
PSI AG, Berlin
- 20.06.2003** *Optimization in Networks*
10 Jahre Fachgebiet Dynamik und Betrieb technischer Anlagen, TU Berlin
- 20.08.2003** *Nonlinear Optimization in Gas Networks*
18th International Symposium on Mathematical Programming, Kopenhagen, Dänemark
- 05.09.2003** *Operative Planning in Drinking Water Supply: A Case Study*
International Conference on Operations Research, Heidelberg
- 29.10.2003** *Optimization in Water and Gas Networks*
Conference on Process Integration, Modeling and Optimization for Energy Saving and Pollution Reduction, Hamilton, Kanada
- 31.10.2003** *Automatische Erzeugung problemspezifischer Sparse-Solver für mehrstufige stochastische Programme*
ZAIK, Universität Köln
- 26.11.2003** *Operative Planning in Berlin's Drinking Water Network*
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“
- 28.11.2003** *Kostenminimale operative Planung in Gasnetzen*
Symposium über mathematische Probleme in der Gaswirtschaft, TU Bergakademie Freiberg
- 01.12.2003** *Varianz und Semivarianz in mehrperiodischen Markowitz-Modellen*
Mini-Workshop „Risikomaße und ihre Anwendungen“, HU Berlin
- 13.12.2003** *Minimum Energy Operation of Gas Distribution Networks*
Workshop „Control of Partial Differential Equations“, TU Berlin

Thomas Steinke

- 12.02.2003** *Strukturvorhersage im Computer – Supercomputing in der Biologie*
Ringvorlesung-Bioinformatik, FUB

Hinnerk Stüben

- 15.–19.07.2003** *Accelerating Hasenbusch's acceleration of Hybrid Monte Carlo*
Posterbeitrag, Lattice 2003, The XXI International Symposium on Lattice Field Theory, Tsukuba, Japan
- 30.08.2003** *Simulating large networks by parallel computing on a supercomputer*
Präsentation von Resultaten des IST-Projekts MOMENTUM im Rahmen des Workshops „Getting Momentum into your UMTS network“, ZIB
- 02.09.2003** *MoDySim – A parallel dynamic UMTS simulator*
ParCo 2003, International Conference on Parallel Computing, TU Dresden

Andreas Tuchscherer

- 18.09.2003** *Dynamische Konfigurierung transparenter optischer Telekommunikationsnetze*
Studentenkonferenz Mathematik 2003 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Rostock
- 28.10.2003** *Dynamische Konfigurierung transparenter optischer Telekommunikationsnetze*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

Brygg Ullmer

- 05.02.2003** *Giving Physical Form to Digital Information.*
Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Potsdam/Golm
- 01.09.2003** *Tangible Query Interfaces: Physically Constrained Tokens for Manipulating Database Queries.*
INTERACT 2003, 1.-5. September, Zürich, Schweiz
- 26.10.2003** *Emerging tangible interfaces for facilitating collaborative immersive visualizations.*
NSF Workshop on Collaborative Virtual Reality and Visualization, Lake Tahoe, Kalifornien, 26.-28. Okt.
- 30.10.2003** *Tangible Interfaces for Computational Science.*
Louisiana State University, Center for Computing and Technology.
- 26.11.2003** *Tangible- and Web-based Tools for Facilitating Interactive 3D Visualization.*
IBM Zürich Research Labs.

Tjark Vredeveld

- 23.01.2003** *Smoothed Competitive Analysis for the Multi-Level Feedback Algorithm*
EIDMA Optimization Seminar, TU Eindhoven, Die Niederlande

- 07.02.2003** *Smoothed Competitive Analysis*
30. Berliner Algorithmen-Tag, Berlin
- 19.06.2003** *On the single server Dial-a-Ride problem to maximize the number of served requests, or, How to whack a mole?*
EIDMA Optimization Seminar, TU Eindhoven, Die Niederlande
- 20.08.2003** *Smoothing Helps: A Probabilistic Analysis of the Multi-Level Feedback Algorithm*
18th International Symposium on Mathematical Programming, Kopenhagen, Dänemark
- 15.09.2003** *How to Whack Moles*
1st Workshop on Approximation and Online Algorithms, Budapest, Ungarn
- 23.09.2003** *Average Case and Smoothed Competitive Analysis for the Multi-Level Feedback Algorithm*
Besliskunde Seminar, Universiteit Maastricht, Die Niederlande
- 19.10.2003** *Smoothed Competitive Analysis: Lower Bounds for Non-Clairvoyant Scheduling*
Learn- and Workshop „Randomness in the design and analysis of algorithms“, Berlin
- 15.09.2003** *How to Whack Moles*
Seminar der DFG-Forschergruppe „Algorithms, Structure, Randomness“, Berlin

Annegret Wagler

- 20.01.2003** *Perfectness is an Elusive Graph Property*
10th ARCO Workshop, Odense, Dänemark
- 25.02.2003** *From Conjecture to Theorem: A Progress Report on the Strong Perfect Graph Conjecture*
IX. ELAVIO, Vaquerías, Argentinien
- 13.03.2003** *Almost all webs are not rank-perfect*
7th International Workshop in Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 14.05.2003** *From Conjecture to Theorem: The Proof on the Strong Perfect Graph Conjecture*
7th Graph Theory Workshop, Rathen
- 23.06.2003** *The Strong Perfect Graph Theorem and consequences for recognizing perfect graphs*
Kolloquium, IASI, Rom, Italien
- 18.08.2003** *Perfectness is an Elusive Graph Property*
18th International Symposium on Mathematical Programming, Kopenhagen, Dänemark

- 02.09.2003** *Perfectness is an Elusive Graph Property*
34th Annual Conference of the Operational Research Society of Italy, Venedig, Italien
- 16.09.2003** *Perfectness is an Elusive Graph Property*
Kolloquium, Universität L'Aquila, Italien
- 14.11.2002** *On the Normal Graph Conjecture for circulant graphs*
Kolloquium über Kombinatorik, Magdeburg
- 25.11.2003** *The Strong Perfect Graph Theorem and consequences for recognizing perfect graphs*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

Steffen Weider

- 29.03.2003** *Die Bündel-Methode und die Integrierte Umlauf- und Dienstplanung*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 02.04.2003** *Stand des Forschungsprojekts „Integrierte Umlauf- und Dienstplanung“*
Mdv Gmbh, München
- 26.06.2003** *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV*
BMBF Workshop Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft, Bad Vilbel
- 07.11.2003** *Ergebnisse des Forschungsprojekts „Integrierte Umlauf- und Dienstplanung“*
Mdv Gmbh, München
- 15.12.2003** *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV*
DFG-Forschungszentrum 86, Netzwerktag 2003, TU Berlin

Tino Weinkauff

- 09.05.2003** *Visualisierungstechniken für Strömungsdaten*
Seminar für Strömungsmechanik am Hermann-Föttinger-Institut, SFB 557, TU Berlin
- 25.11.2003** *Feature-Extraktion von 3D-Vektorfeldern*
Forschungsseminar des Instituts für Computergraphik, Universität Rostock

Martin Weiser

- 24.01.2003** *Adaptive Particle Methods for Molecular Dynamics: Classical Liouville Equation*
19th GAMM-Seminar Leipzig on „High-dimensional problems - Numerical treatment and applications“, Max-Planck-Institut (MPI), Leipzig

18.02.2003 *An Adaptive Multilevel Central Path Method for Optimal Control*
„Numerical Techniques for Optimization Problems with PDE Constraints“, Ma-
thematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

28.05.2003 *Adaptive Multilevel Methods for Optimal Control Problems*
DFG FZT86 Tandem Workshop on „Geometry, Numerics and Visualization“,
Sauen/Brandenburg

Andreas Wendleder

20.11.2003 *Einführung in den Lenne3D-Player*
Expertenworkshop Lenné3D, ZALF Müncheberg

Jan Wendler

26.03.2003 *Automatisches Modellieren von Agenten-Verhalten - Erkennen, Verstehen
und Vorhersage*
Fachhochschule Zittau/Görlitz, Fachbereich Informatik

26.08.2003 *Modellierung von Agenten-Verhalten - Erkennen, Verstehen und Vorher-
sagen von Verhalten in komplexen Multi-Agenten-Systemen*
Dissertations-Verteidigung, Humboldt-Universität zu Berlin

03.10.2003 *FlowGrid - Flow Simulations On-Demand Using Grid-computing*
HP Labs, Bristol

03.10.2003 *Agent Behaviour Modelling - Recognizing and Predicting Soccer Agent
Behaviour using Case Based Reasoning*
HP Labs, Bristol

Roland Wessäly

22.08.2003 *Models for UMTS Radio Network Planning*
18th International Symposium on Mathematical Programming, Kopenhagen,
Dänemark

31.08.2003 *Automatic Planning and Optimisation*
Final Workshop MOMENTUM, Berlin

20.09.2003 *Optimization in Telecommunications*
Business School, Fribourg, Schweiz

20.10.2003 *Comparing Restoration Concepts using Optimal Network Configurations
with Integrated Hardware and Routing Decisions*
4th International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks
(DRCN 2003), Banff, Kanada

28.10.2003 *Integrated Optimization of Hardware Configuration and Capacity Dimen-
sioning in SDH and opaque WDM networks*

International Network Optimization Conference (INOC 2003), Paris, Frankreich

Stefan Zachow

- 18.03.2003** *CoDiSP: Collaborative Distributed Surgery Planning*
Präsentation auf der CeBit 2003, DFN – Future Talk, Hannover, Germany
- 25.06.2003** *Draw & Cut: Intuitive 3D Osteotomy Planning on Polygonal Bone Models*
7. Annual Conference of the International Society for Computer Aided Surgery (ISCAS/CARS), London, UK
- 04.12.2003** *Computergestützte 3D Planung von knochenverlagernden Operationen in der MKG-Chirurgie*
Kolloquiumsvortrag an der TU Berlin, FB 13, Institut für Technische Informatik, Fachgebiet: Computer Graphics - Computergestützte Medizin

Adrian Zymolka

- 03.02.2003** *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*
7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM) 2003, Budapest, Ungarn
- 24.04.2003** *Polyhedral investigations on stable multi-sets*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 18.08.2003** *Polyhedral investigations on stable multi-sets*
18th International Symposium on Mathematical Programming, Kopenhagen, Dänemark
- 27.08.2003** *Design of optical networks*
Anlässlich des Besuches von Prof. Hattingh, ZIB, Berlin
- 03.09.2003** *Wavelength assignment with converters in all-optical networks*
International Conference on Operations Research (OR 2003), Heidelberg
- 20.10.2003** *Demand-wise Shared Protection in Meshed optical Networks*
4th International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks (DRCN 2003), Banff, Kanada

7.2 Vorlesungen und Seminare

Artur Andrzejak: FU Berlin

SS 03 *Informationsverwaltung im Web* (Seminar, Mitveranstalter: H.F. Schweppe (FU Berlin))

WS 03/04 *Verteilte Algorithmen* (Vorlesung)

Wolfgang Baumann: TU Berlin

WS 02/03 *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, Mitveranstalter: F. Thiele)

WS 02/03 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung, Mitveranstalter: H. Stüben (ZIB))

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 03 *Geometrische Funktionentheorie* (Vorlesung)

Frank Cordes: FU Berlin

WS 02/03 *Moleküldynamik und Virtuelles Screening* (Algorithmische Bioinformatik und Ringvorlesung FU Berlin)

WS 02/03 *Visualisierung, Modellierung, Dynamik und Simulation von Biomolekülen* (Softwarepraktikum, Mitveranstalter: T. Steinke, ZIB; R. Preissner, HUB)

WS 02/03, SS 03 *Moleküle im Rechner* (Seminar, Mitveranstalter: Ch. Schütte und B. Schmidt, FU Berlin)

Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 02/03, SS 03 *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing* (Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), H. Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), R. März (HU), C. Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

WS 02/03, SS 03 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden* (Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), C. Schütte (FUB))

Martin Grötschel: TU Berlin

WS 02/03 *Ökonomische Modelle aus mathematischer Sicht* (Vorlesung)

SS 03 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen (ADM I)* (Vorlesung)

WS 03/04 *Lineare Optimierung (ADM II)* (Vorlesung)

WS 03/04 *Matchings, Flüsse und Verallgemeinerungen* (Blockseminar)

Tobias Jahnke: FU Berlin

WS 03/04 *Pharmakokinetik* (Seminar, zusammen mit W. Huisinga und W. Liebermeister)

Bernd Kallies: FU Berlin

WS 02/03 *Konformationsanalyse und Moleküldynamik* (Einführungsvorlesung zum Software-Praktikum des Bioinformatik-Master-Studienganges der FU Berlin)

Gunnar Klau: FU Berlin

SS 03 *Graphenzeichnen* (Seminar, in Zusammenarbeit mit Günter Rote)

Thorsten Koch: Berufsakademie Berlin

SS 03 *Mathematische Methoden der Informatik II* (Vorlesung)

WS 03/04 *Mathematische Methoden der Informatik I* (Vorlesung)

Sven Krumke: TU Berlin

WS 02/03 *Fortgeschrittene Datenstrukturen und Algorithmen* (Vorlesung)

SS 03 *Randomisierte Algorithmen und Probabilistische Analyse* (Vorlesung)

Sven Krumke: Escuela Politécnica Nacional Quito, Ecuador

SS 03 *Advanced Combinatorial Algorithms* (Blockveranstaltung im Doktorandenprogramm *Programa Individual de Doctorado en Matemática Aplicada*)

Sven Krumke: TU Kaiserslautern

WS03/04 *Optimierung II: Integer Programming* (Vorlesung)

Monika Kuberek: HU Berlin

WS 03/04 *Bibliothekarische Verbände* (Blockseminar im Studiengang Wissenschaftliche Bibliothekarin/Wissenschaftlicher Bibliothekar des Postgradualen Fernstudiums am Institut für Bibliothekswissenschaft der HU Berlin)

Frank Lutz: TU Berlin

WS 02/03 *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)

SS 03 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen (ADM I)* (Übung/Programmierbetreuung)

WS 03/04 *Lineare Optimierung (ADM II)* (Übung/Programmierbetreuung)

WS 03/04 *Matchings, Flüsse und Verallgemeinerungen* (Seminar)

Marc Pfetsch: FU Berlin

WS 03/04 *Lineare Optimierung* (Vorlesung)

Jörg Rambau: TU Berlin

SS 03 *Zeitdiskrete Dynamische Systeme* (Vorlesung)

WS 03/04 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

Jörg Rambau: Mathematical Sciences Research Institute, Berkeley, USA

SS 03 *Triangulations of Point Sets: Applications, Structures, Algorithms* (Summer Graduate Program)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

SS 03 *Forschungsseminar Grid Computing* (Seminar)

SS 03 *Parallele Algorithmen in der Bioinformatik* (Seminar, Mitveranstalter: T. Steinke (ZIB))

WS 03/04 *Verteilte Datenstrukturen in Peer-to-Peer-Systemen* (Seminar, Mitveranstalter: A. Andrzejak (ZIB))

WS 03/04 *IA-64 versus Power4: Architektur und effiziente Programmierung* (Vorlesung, Mitveranstalter: F. Hupfeld, T. Schütt (ZIB))

Carlos Saro: FHTW Berlin

SS 03 *Datenstrukturierung für museumsspezifische Anwendungen* (Blockseminar am Fachbereich Museologie)

Alexander Steidinger: FU Berlin

WS 02/03 *Visualisierung, Modellierung, Dynamik und Simulation von Biomolekülen* (Softwarepraktikum, Betreuung des Projektteils Java-Programmierung für Datenbanken und Webinterfaces)

Marc Steinbach: TU Berlin

WS 02/03 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

Thomas Steinke: FU Berlin

WS 02/03 *Proteine: Struktur, Modellierung, Dynamik, (im Rahmen der Vorlesung "Algorithmische Bioinformatik")* (Vorlesung)

SS 03 *Visualisierung, Modellierung und Simulation von Biomolekülen* (Vorlesung, Software-Praktikum), Mitveranstalter: F. Cordes (ZIB)

Hinnerk Stüben: FU Berlin

17.–21.02.2003 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP*
(Integrierte Veranstaltung, Mitveranstalter: W. Baumann (ZIB))

Tjark Vredeveld: TU Berlin

WS 03/04 *Analysis I für Ingenieure (ET)* (Vorlesung)

Annegret Wagler: Berufsakademie Berlin

SS 03 *Mathematische Methoden der Informatik II* (Vorlesung)

WS 03/04 *Mathematische Methoden der Informatik I* (Vorlesung)

Annegret Wagler: Universität L'Aquila, Italien

SS 03 *Graph Theoretical Problems and Related Polytopes: Stable Sets and Perfect Graphs* (Block-Vorlesung)

Martin Weiser: FU Berlin

WS 03/04 *Computerorientierte Mathematik I* (Vorlesung, Übung: G. Carqué, FUB)

Martin Weiser, Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 03/04 *Numerik der Optimalsteuerung* (Vorlesung, Übung: A. Schiela, ZIB)

7.3 Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

Martin Grötschel

24.05.–25.05.2003 *IMU Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) Meeting*, ZIB, Berlin

18.08.–22.08.2003 *18th International Symposium on Mathematical Programming*, Kopenhagen, Dänemark

15.12.2003 *Netzwerktage 2003 des DFG-Forschungszentrums „Mathematik für Schlüsseltechnologien“*, TU Berlin

Hans-Christian Hege

13.03.2003 *Statustagung „Lenné3D: 3D-Landschaftsplanung“*, Hasso-Plattner-Institut (HPI), Potsdam

24.04.2003 *ESA-Meeting „2D and 3D Quantification of Bone Structure“*, Universitätsklinikum Benjamin Franklin (UKBF), Berlin

23.-25.06.2003 *SGP'03, Symposium on Geometry Processing, Eurographics/ACM (Mitglied des Programmkomitees), Aachen*

19.-24.10.2003 *Vis'03, IEEE Visualization Conference (Mitglied des Programmkomitees), Seattle (WA), USA*

Sven Krumke

12.–13.09.2003 *Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, Klagenfurt, Österreich*

Philip Paar

13.03.2003 *Statustagung “Lenné3D: 3D-Landschaftsplanung”, Hasso-Plattner-Institut (HPI), Potsdam*

Steffen Prohaska

24.04.2003 *ESA-Meeting “2D and 3D Quantification of Bone Structure”, Universitätsklinikum Benjamin Franklin (UKBF), Berlin*

Alexander Reinefeld

01.10.2003 *German Grid Day: Towards a German D-Grid, Kirchhoff-Institut, Heidelberg*

Marc Steinbach

26.–27.06.2003 *BMBF-Workshop „Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft“, Bad Vilbel*

Thomas Steinke

10.–13.04.2003 *The Seventh Annual International Conference on Research in Computational Molecular Biology, RECOMB 2003, Berlin*

Tjark Vredeveld

05.–07.03.2003 *Tandem Workshop „Online Algorithms“ des DFG-Forschungszentrums „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Erkner*

TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

8.1 Gastvorträge

- 06.01.2003** Volker Kaibel (TU Berlin):
Obere Schranken für Random Edge auf 3-Polytopen
- 07.01.2003** Oliver Sander (FU Berlin, Fachbereich Mathematik):
The AMLE Equation and How to Solve it on Hypersurfaces
- 10.01.2003** Kurt Busch (Theoretical Nano-Photonics, Universität Karlsruhe & DFG-Forschungszentrum “Functional Nanostructures”):
A solid state theoretical approach to the optical properties of photonic crystals
- 14.01.2003** Oliver Wirjadi (TU Berlin, Fachbereich Informatik):
Multiple Image Radiography
- 17.01.2003** Johannes Goller (Centrum für Informations- und Sprachverarbeitung, Ludwig-Maximilians-Universität München):
Identifikation und Klassifikation wissenschaftlicher Texte, Generierung von Table of Contents, Metadaten, etc.
- 17.01.2003** Franz Guenther (Centrum für Informations- und Sprachverarbeitung, Ludwig-Maximilians-Universität München):
Verteilter Dokumentenserver und Internet-Suchmaschinen
- 21.01.2003** Martin Rumpf (Gerhard Mercator–Universität Duisburg):
Geometrische Methoden in der Bild- und Flächenverarbeitung
- 24.01.2003** Carlos Andradas (Universidad Complutense de Madrid, Spanien):
Semialgebraic sets: some questions and answers about their description and separation
- 03.02.2003** Michael Krivelevich (Tel Aviv University, Israel):
List coloring of graphs
- 04.02.2003** Daniel Bienstock (Columbia University, New York, USA):
Convexification and Lifting
- 18.02.2003** Thomas Lange (Klinik für Chirurgie und Chirurgische Onkologie, Charité, Campus Berlin-Buch):
Nonlinear Diffusion Filtering: Theory, Implementation, Application

- 29.04.2003** René Weiskircher (Technische Universität Wien, Österreich):
Bend Minimization in Orthogonal Drawings Using Integer Programming
- 26.05.2003** Volker Kaibel (TU Berlin):
Erwartete Graphendichte von zufälligen 0/1-Polytopen
- 30.05.2003** Ralf Hiptmair (SAM, ETH–Zürich, Schweiz):
Coercive Combined Field Integral Equation for Direct Scattering
- 15.07.2003** Frank Scholz (Universitätsbibliothek der Universität Stuttgart):
Online-Publikationsverbund (OPUS)
- 27.08.2003** Michael Kohlhasse (Electrical Engineering & Computer Science, International University Bremen):
OMDoc: An Open Markup Format for Mathematical Documents (A building Block for Web-Based Math)
- 28.08.2003** Michael D. Plummer (Vanderbilt University, Nashville, USA):
Some Recent Work in three Areas of Matching Theory
- 11.09.2003** Tobias Harks (Universität Münster):
Berechnung optimaler Angebotskurven in Elektrizitätsmärkten
- 12.09.2003** Volker Conradt (Bibliotheksservice-Zentrum Baden-Württemberg (BSZ), Universität Konstanz):
Metadaten und Workflow für elektronische Ressourcen im BSZ
- 16.09.2003** Thomas Nowotny (Institute for Nonlinear Science, UCSD, La Jolla, California, USA):
Mathematisch–physikalische Modellierung des olfaktorischen Systems von Insekten
- 09.10.2003** Hoang Xuan Phu (Institute of Mathematics, Vietnam National Center for Sciences and Technology, Hanoi, Vietnam):
Simulation and Control of a River System
- 28.10.2003** Hang Si (WIAS, Berlin):
TetGen – a 3D Tetrahedral Mesh Generator Based on the Delaunay Method
- 01.12.2003** Andreas Westerlund (Universität Linköping, Schweden):
The Heterogeneous Fleet Vehicle Routing Problem
- 05.12.2003** Guido Schäfer (MPI Saarbrücken):
Matching Algorithms are Fast in Sparse Random Graphs
- 08.12.2003** Marc Alexa (Technische Universität Darmstadt):
Konstruktion von impliziten Flächen aus Punktdaten
- 12.12.2003** Kerstin Hesse (The University of New South Wales, Sydney, Australien):
Optimale Fehlerabschätzung für Integration auf der Späre in Sobolevräumen

8.2 Gastaufenthalte

Raquel Gurgel Silva (Centro de Pesquisa em Optica e Fotonica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brazil)

01.12.2002–28.02.2003

Volker Kaibel (TU Berlin)

06.01.2003

Kurt Busch (Theoretical Nano-Photonics, Universität Karlsruhe und DFG-Forschungszentrum “Functional Nanostructures”)

10.01.2003

Johannes Goller (Centrum für Informations-und Sprachentwicklung, LMU München)

17.01.2003

Franz Guenther (Centrum für Informations-und Sprachentwicklung, LMU München)

17.01.2003

Carlos Andradas (Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spanien)

24.01.2003

Michael Krivelevich (Tel Aviv University, Israel)

03.02.2003

Daniel Bienstock (Columbia University, New York, USA)

04.02.2003

Bülent Karasözen (Middle East Technical University (METU), Ankara, Türkei)

05.–06.02.2003

Jens Klein (Universität Münster)

09.–15.02.2003

Stefan Kunis (Universität Lübeck)

09.–15.02.2003

Reiner Diedrichs (Verbundzentrale des GBV, Göttingen)

18.02.2003

Jürgen Krause (Informationszentrum Sozialwissenschaften, Bonn)

18.02.2003

Gerhard Schneider (Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung, Göttingen)

18.02.2003

Ernst Althaus (Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken)

16.–19.03.2003

- Herman Kronenberg** (HBZ Nordrhein-Westfalen)
23.–25.03.2003
- Anders Nedergaard Jensen** (Braband, Denmark)
23.–26.03.2003
- Rekha Thomas** (Department of Mathematics, University of Washington, USA)
23.–26.03.2003
- Mikhail Kulagin** (Center for Scientific Telecommunications and Information Technologies, RAS, Moskau, Russland)
10.–13.04.2003
- Vladimir Serebryakov** (Center for Scientific Telecommunications and Information Technologies, RAS, Moskau, Russland)
10.–13.04.2003
- Montserrat Bóo Cepeda** (Univ. Santiago de Compostela, Spanien)
11.04.2003–10.07.2003
- René Weiskircher** (Technische Universität Wien, Österreich)
29.04.2003
- Volker Kaibel** (TU Berlin)
26.05.2003
- Roland Klose** (Schönberg)
19.–20.06.2003
- Wolfram Büttner** (Siemens AG, München)
23.–25.06.2003
- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques, EPFL, Lausanne, Schweiz)
23.–25.06.2003
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
24.–25.06.2003
- Horst Simon** (NERSC, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkely, Kalifornien, USA)
23.–25.06.2003
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)
23.–25.06.2003
- Thomas Wolf** (Brock University, St. Catherines, Ontario, Kanada und ZIB Fellow)
07.–09.07.2003
- Cornelia Kober** (FH Osnabrück)
07.–11.07.2003
- Frank Scholz** (Bibliothek der Universität Stuttgart)
15.07.2003

Gordon Erlebacher (School of Computational Science & Information Technology,
Florida State University Tallahassee, USA)
11.08.2003–03.09.2003

Michael Kohlhase (Internationale Universität Bremen)
27.08.2003

Michael D. Plummer (Vanderbilt University, Nashville, USA)
28.08.2003

Tobias Harks (Universität Münster)
11.09.2003

Volker Conrad (Bibliotheksservice-Zentrum Baden-Württemberg, Universität Kon-
stanz)
12.09.2003

Wolfram Neubauer (Bibliothek der ETH Zürich, Schweiz)
29.–30.09.2003

Ute Schwens (Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt/Main)
29.–30.09.2003

Alexandra Enriquez (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador)
29.09.–29.11.2003

Sandra Gutierrez (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador)
29.09.–29.11.2003

Hoang Xuan Phu (Institute of Mathematics, Vietnam National Center for Sciences
and Technology, Hanoi, Vietnam)
06.–11.10.2004

Andreas Westerlund (Universität Linköping, Sweden)
01.11.2003–30.04.2004

Roel Bovendeerd (Universiteit Maastricht, Maastricht, Niederlande)
25.11.–01.12.2003

Ulrike Eich (Bibliothek der RWTH Aachen)
28.11.2003

Stefan Gradmann (Regionales Rechenzentrum der Universität Hamburg)
28.11.2003

Manfred Thaller (Historisch-Kulturwissenschaftliche Informationsverarbeitung,
Universität Köln)
28.11.2003

Guido Schäfer (MPI Saarbrücken)
05.12.2003

Marc Alexa (Technische Universität Darmstadt)
08.–09.12.2003

8.3 Tagungen und Veranstaltungen

- 09.01.2003** GridLab Project Meeting
Veranstalter: André Merzky, Alexander Reinefeld
- 17.01.2003** Verteilter Dokumentenspeicher, Verteilter Zeitschriftenserver und Internet-Suchmaschinen
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 30.01.2003** Workshop „Strategische Planung im ÖPNV“, in Kooperation mit dem DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“
- 06.02.2003** Workshop „Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle“, in Kooperation mit dem DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“
- 24.–25.02.2003** FlowGrid Project Meeting
Veranstalter: Alexander Reinefeld, Florian Schintke, Jan Wendler
- 25.03.2003** 2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 12.05.2003** ZACK-Workshop
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 26.06.2003** Besuch einer russischen Delegation
Veranstalter: Alexander Reinefeld
- 30.06.2003** Workshop Online-Fernleihe
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 08.07.2003** Quantenchemie/Dichtefunktionaltheorie, Workshop des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN
Veranstalter: Bernd Kallies
- 06.08.2003** IFLA 2003 - Bibliotheksbesuche/Fachbesichtigungen „Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – KOBV“
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 30.08.2003** MOMENTUM Workshop – Models and Simulations for Network Planning and Control of UMTS
- 17.09.2003** Hochleistungsrechnen am ZIB, Vortrag und Führung für Berufsschüler der Fa. URANO Informationssysteme GmbH, Bad Kreuznach, Veranstalter: H. Stüben
- 28.09.2003** Z39.50-Workshop für SISIS-Anwender im KOBV
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 31.10.–01.11.2003** First Berlin Molecular Dynamics Meeting
Veranstalter: Thomas Steinke, Jan Saam (HUB)
- 13.–14.11.2003** GOR-Workshop 34 „Optimierung im Öffentlichen Nahverkehr“

8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 23.01.–25.01.2003** 11th Ann. Medicine Meets Virtual Reality Conference (MMVR), Newport Beach (CA):
Medical application software built on top of AMIRA (H. Lamecker, S. Prohaska)
- 09.03.–11.03.2003** Bildverarbeitung für die Medizin: Algorithmen - Systeme - Anwendungen (BVM 2003), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg:
Medizinische Anwendungen mit Amira AMIRA (H. Lamecker, T. Lange, H. Schirmacher)
- 12.03.–19.03.2003** CeBIT 2003:
Präsentation des Softwareprogramms JCMmode (Frank Schmidt, Lin Zschiedrich)
- 25.03.2003** 2. KOBV-Forum „Neue Dienste – Chancen und Perspektiven“, KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin:
Demonstration der Online-Fernleihe im KOBV: Raluca Rascanu
- 24.–27.06.2003** 18th International Supercomputer Conference (ISC2003) Heidelberg:
Darstellung des HLRN-Systems im Rahmen der Ausstellung „The European Supercomputing Summit“; Wolfgang Baumann, Thomas Steinke
- 30.06.2003** KOBV-Workshop „Online-Fernleihe“, KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin:
Demonstration der Online-Fernleihe – Endnutzer-Bestellung: Raluca Rascanu
- 30.06.2003** KOBV-Workshop „Online-Fernleihe“, KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin:
Demonstration des Bibliothekskontos – Verwaltung und Bearbeitung der Fernleihbestellungen: Raluca Rascanu
- 03.–06.08.2003** IFLA-Weltkongress Bibliothek und Information „Bibliothek als Portal: Medien – Information – Kultur“, Berlin:
Demonstration: KOBV-Suchmaschine, Testversion des KOBV-Informationssportals: Monika Kuberek, Beate Rusch
- 09.–10.10.2003** Buchmesse, Frankfurt am Main:
Präsentation des Leistungsspektrums und der Aktivitäten des Friedrich-Althoff-Konsortiums und der Arbeitsgemeinschaft der Konsortien (GASCO): Uta Kaminsky
- 20.–21.10.2003** Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Berlin:
Vorführung des im Projekt entwickelten Datenbankprogramms GOS: Carlos Saro
- 12.–14.11.2003** 7. InetBib-Tagung, Frankfurt am Main:
Demonstration: KOBV-Suchmaschine, Testversion des KOBV-Informationssportals: Andres Imhof, Monika Kuberek, Christian Oesterheld

8.5 Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit

Das ZIB und seine Arbeitsbereiche erfreuen sich seit Jahren eines ständig steigenden Interesses bei Schüler- und Studentengruppen. Dies zeigt die Vielzahl von Führungs- und Vortragsveranstaltungen, die von Mitarbeitern des ZIB sowohl im Haus als auch extern durchgeführt werden.

Der Interessensschwerpunkt des Publikums liegt dabei auf den Anwendungen der Mathematik einerseits und der Informationstechnik bzw. den Hochleistungsrechnern andererseits. An beispielhaften Projekten werden mathematische Methoden, ihre Umsetzung in spezielle Algorithmen und die Bearbeitung auf Rechnern der verschiedenen Leistungsklassen demonstriert. Weiterhin werden aktuelle Forschungsarbeiten aus der Informatik und die vorhandenen Systeme im Rechner- und Datenraum mit den roboterbedienten Bandsilos vorgestellt. Während Rechner und Informatik auf ohnehin vorhandenes breites Interesse bei Schülern und Studenten stoßen, ist der Einsatzbereich der Mathematik nicht immer offensichtlich. Die Veranstaltungen tragen zur Aufklärung darüber bei, in welchen Bereichen und mit welchen Methoden die Mathematik überall eine Rolle spielt.

- 13.01.2003** Von der Schönheit und dem Nutzen der Mathematik, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, Podiumsdiskussion InfoRadio/Technologiestiftung Berlin
- 16.01.2003** Von chinesischen Postboten und optimalen Telefonnetzen – neue Themen für den Mathematikunterricht im Praxistest, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, Lehrernachmittag von BMG und MNU, TU Berlin
- 11.02.2003** Studenten des Studiengangs Physikalische Ingenieurwissenschaft der TU Berlin, Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB und im HLRN, Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 13.02.2003** Mathematik – Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, Vortrag: Martin Grötschel, Urania, Berlin
- 28.03.2003** Das Lächeln der Mathematiker, Festvortrag: Peter Deuffhard, Eröffnungsfeier des Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics der Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Universität Linz
- 02.04.2003** Studenten der Universität Osnabrück, Studiengang Angewandte Systemwissenschaft, Vorträge zu Differentialgleichungen in der Praxis und zum Grid Computing sowie Besichtigung der Hochleistungsrechner, Veranstalter: Hubert Busch, Ralf Götz, Ulrich Nowak, Jan Wendler
- 08.05.2003** Im Jahr 2003 wurde der bundesweite „Girls Day“ veranstaltet, an dem sich das ZIB erstmals mit folgenden Vorträgen beteiligte:
- Wolfgang Baumann: Supercomputer
 - Liviu Coconu: 3-D-Wissenschaftskino
 - Monika Moser: Supercomputer

- Olaf Paetsch: 3-D-Wissenschaftskino

15.05.2003 Mathematik: Hassobjekt oder Technologiemotor? Vortrag: Martin Grötschel, Veranstaltung „Leuchttürme der Berliner Wissenschaft“ im Rahmen der Reihe „Gespräche im Parlament“, Abgeordnetenhaus Berlin

17.05.2003 Warum man Bäume zum Telefonieren braucht – ein Beispiel aus der kombinatorischen Optimierung, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, 8. Berliner Tag der Mathematik, TFH Berlin

17.05.2003 Wenn das Handy klingelt: Zur Mathematik des Telefonierens, Vortrag: Roland Wessäly, Tag der Mathematik, 8. Berliner Tag der Mathematik, TFH Berlin

02.06.2003 „Besser als Mathe“! – Kombinatorische Optimierung im Mathematikunterricht, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, Humboldt-Universität zu Berlin

10.06.2003 Das Lächeln der Mathematiker, Vortrag: Peter Deuffhard, Ernst-Reuter-Gesellschaft der Freien Universität Berlin

14.06.2003 Herausragende Veranstaltung im Jahr 2003 war wieder die Beteiligung des ZIB mit drei Präsentationen in der „Langen Nacht der Wissenschaften“. Geboten wurden: 3D-Wissenschaftskino mit Visualisierungen aus naturwissenschaftlichen und medizinischen Anwendungsprojekten des ZIB, Biomoleküle im Rechner in Kooperation mit dem BCB, Simulation und Optimierung eines chemischen Kombinationsreaktors sowie Führungen zur Besichtigung der Hochleistungsrechner. Insgesamt wurden 1256 Besucher im ZIB gezählt, von denen etwa 370 Personen an den Supercomputerführungen teilnahmen, obwohl teilweise längere Wartezeiten in Kauf genommen werden mussten, da die Führungen aus Sicherheitsgründen nur in Kleingruppen stattfinden konnten. Erstmals wurde auch ein spezielles Kinderprogramm geboten (123 Teilnehmer). Mit Vorträgen waren an der Langen Nacht der Wissenschaften beteiligt:

- Daniel Baum: Biomoleküle im Rechner
- Wolfgang Baumann: Hochleistungsrechner der Extraklasse
- Frank Cordes: Biomoleküle im Rechner
- Hans-Hermann Frese: Superrechner und Datenroboter im ZIB
- Hans-Christian Hege: 3D-Wissenschaftskino
- Felix Hupfeld: StorageBox — Persönliche Dateiverwaltung der nächsten Generation
- Ralf Kähler: 3D-Wissenschaftskino
- Bernd Kallies: Wissenschaftliches Rechnen am ZIB
- Dirk Krickel: Computer für Kids
- Ulrich Nowak: Real und virtuell – ein chemischer Kombinationsreaktor
- Olaf Paetsch: Computer für Kids

- Jörg Rambau: Wo bleibt der Aufzug?
- Hartmut Schirmacher: 3D-Wissenschaftskino
- Johannes Schmidt-Ehrenberg: Biomoleküle im Rechner
- Thomas Steinke: Biomoleküle im Rechner
- Hinnerk Stüben: Hochleistungsrechner der Extraklasse
- Malte Westerhoff: 3D-Wissenschaftskino

19.06.2003 3D-Wissenschaftskino, Biologie–Studenten der FU Berlin, Prof. Achazi, Vortrag: Daniel Baum

24.06.2003 „Besser als Mathe“! – Kombinatorische Optimierung im Mathematikunterricht, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, Gastvortrag Universität Würzburg

30.08.2003 Numerische Relativitätstheorie, Vortrag: Ralf Kaehler, Präsentation am “Tag der offenen Tür” Max-Planck-Campus, Golm

04.09.2003 Mit Diskreter Mathematik optimal zum Ziel – neue Themen für den Mathematikunterricht, Vortrag: Brigitte Lutz-Westphal, 2. Berliner MNU-Kongress

10.09.2003 Besuch einer Schülergruppe im Rahmen eines Schülerseminars, Prof. Schulze (FU Berlin), Veranstalter: P. Deuffhard, Vorträge: D. Baum, F. Cordes, B. Kallies, O. Paetsch, T. Steinke

17.09.2003 Hochleistungsrechnen am ZIB, Vortrag und Führung für Berufsschüler der Fa. URANO Informationssysteme GmbH, Bad Kreuznach, Veranstalter: H. Stüben

28.10.2003 Schüler der Lilly–Braun–Oberschule in Berlin–Spandau
Veranstalter: P. Deuffhard, H.-C. Hege, Vorträge: D. Baum, B. Kallies, J. Rambau

20.11.2003 Mathematik – Die verborgene Schlüsseltechnologie, Vortrag: Martin Grötschel, Emil-Fischer-Gymnasium, Schwarzheide

25.11.2003 Das ADAC-Projekt – Und was hat das mit Mathematik zu tun? Vortrag: Jörg Rambau, MatNat-Tage, Bühring-Oberschule, Berlin

26.11.2003 Das Lächeln des Mathematikers – Operationsplanung und postoperative Vorhersage in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Vortrag: Peter Deuffhard, Heinz Nixdorf MuseumsForum, Paderborn

11.12.2003 Studenten der Angewandten Informatik der FHTW Berlin, HLRN – Aktuelle Möglichkeiten in Norddeutschland für High Performance Computing
Veranstalter: Wolfgang Baumann

19.12.2003 MINT 300 Schüler–Seminar
Veranstalter: P. Deuffhard, H.-C. Hege, Vorträge: Tobias Gänzler, Olaf Paetsch, Anton Schiela, Martin Weiser

ORGANISATORISCHES

Das Konrad–Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984¹ gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des 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.

9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 2003 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, HUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Jörg Steinbach, TUB, stellvertretender Vorsitzender
- Prof. Dr. Gerhard Braun, FUB — bis 06.07.2003
Prof. Dr. Helmut Keupp, FUB — ab 07.07.2003
- Dr. Peer Pasternack, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — bis 30.09.2003
Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — ab 01.10.2003
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Arbeit und Frauen
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung
- Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn–Meitner–Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max–Delbrück–Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 27. Januar und 01. Juli 2003.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

¹<http://www.zib.de/General/Organization/gesetz/index.de.html>

9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates².

9.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

Der Verwaltungsrat hat als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates bestellt:

Prof. Dr. Alfred Louis	– Universität des Saarlandes, Saarbrücken Sprecher des Beirates
Prof. Dr. Wolfram Büttner	– Infineon Technologies AG, München
Prof. Dr. Hanns–Jürgen Lichtfuß	– Technologiestiftung Berlin, Berlin
Prof. Dr. Thomas Liebling	– Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens, Schweiz
Dr. Joachim Römelt	– Bayer AG, Leverkusen
Prof. Dr. Karl–Victor von Schöning	– Inpro GmbH, Berlin
Dr. Horst D. Simon	– NERSC, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA
Dr.–Ing. Erhard Winter	– E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 24. und 25. Juni 2003 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

²<http://www.zib.de/General/Organization/satzung/index.de.html>

1. CRAY User Group — bis 31.12.2003
2. DFN — Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V.
3. DMV — Deutsche Mathematiker-Vereinigung e.V.
4. ECMI — European Consortium for Mathematics in Industry
5. FAV — Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
6. Forum für Zukunftsenergien
7. IDW — Informationsdienst Wissenschaft
8. Konrad-Zuse-Gesellschaft
9. NAG Users Association
10. SIAM — Society for Industrial and Applied Mathematics
11. UNICORE Forum e.V.
12. ZKI — Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.
13. Zuse Park e.V.

9.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2003 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Reinhard Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg)
Mathematische Multiskalen — Modellierung in der Neurobiologie
- Prof. Dr. Rolf Krause (Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn) —
seit November 2003
Numerische Simulation in der Operationsplanung
- Dr. Thomas Wolf (University of London/Brock University, Kanada)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 2003 wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)
Wolfgang Dalitz
Marlies Engelke
Bodo Erdmann
Klaus Jacobsen
Gabriele Kempf
Dirk Krickel

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die im Jahre 2003 nochmals verstärkt deutlich gewordenen finanziellen Schwierigkeiten des Landes Berlin geprägt — eine Situation, die immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausstattung zu 100% vom Land finanzierten Einrichtung zu beeinträchtigen droht. Die im Sommer 2003 vereinbarten spürbaren Kürzungen der Gehälter aller Beschäftigten im öffentlichen Dienst des Landes Berlin zeigen das finanzielle Dilemma deutlich auf. Die besondere Situation im Wissenschaftsbereich ist in den Tarifregelungen in keiner Weise berücksichtigt — ein Zustand der für ein in weiten Teilen aus Drittmitteln finanziertes Institut und für dessen Beschäftigte absurde Konsequenzen zur Folge hat. Das Land hat ab 2004 weitere, die bisherigen Kürzungen verstärkende Einschnitte angekündigt. Da zudem die Drittmitteleinnahmen aus Industrie und Wirtschaft in bestimmten Teilbereichen wie z.B. der Telekommunikation einbrechen, sind die finanziellen Ausblicke wenig erfreulich.

Die SPD/PDS-Koalitionsvereinbarung von Januar 2002 sieht vor, das ZIB in eine Bund-Länder-Finanzierung zu überführen. Dadurch wird vom Land Berlin eine Entlastung des Wissenschaftshaushaltes angestrebt. Die erforderliche Anmeldung zur "Blauen Liste" ist erfolgt, gilt aber aufgrund des Umfangs der bereits bestehenden Warteliste als wenig aussichtsreich.

Der Zuschuss des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2003 "überrollt" und in gleicher Höhe wie für 2002 eingestellt worden. Für die entscheidungsreifen *investiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnte damit die Beschaffung des HLRN-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 20,5 Millionen Euro weitgehend abgeschlossen werden. Das System hat zum 01.04.2003 den kontingentierten Betrieb aufgenommen.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2003 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 15.379 T€; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 10.827 T€ und auf Investitionen 4.552 T€.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss von 6.881 T€ (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmitteleinnahmen ist — vor Aufstellung des Jahresabschlusses — mit 4.187 T€ anzusetzen. Damit werden die Drittmitteleinnahmen zwar geringer sein als in der Ausnahmesituation des Vorjahres (4.478 T€), immerhin aber als zweitbestes Ergebnis in der Geschichte des ZIB erneut einen Spitzenwert erreichen. Ein nahezu ausgeglichener Jahresabschluss 2003 ist zu erwarten.

Die in den letzten Jahren sehr positive Entwicklung der Einnahmen aus Drittmitteln, einem wesentlichen, wenn auch nicht dem einzigen Indikator für die Forschungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, lässt sich anhand der nachstehenden Tabelle (Jahresabschlussrelevante Angaben) ablesen.

	Drittmiteleinnahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte investiv T€	Sonstige Einnahmen T€	Einnahmen insgesamt T€
	Wirtschaft/ Industrie T€	öffentliche Mittel T€	insgesamt T€	konsumtiv T€	investiv T€			
1993	366	410	776	4.140	931	175	72	6.094
1994	910	875	1.785	4.245	4.472	3.834	78	14.414
1995	1.310	600	1.910	4.681	2.322	1.683	51	10.647
1996	1.168	755	1.923	4.863	511	0	51	7.348
1997	1.279	1.330	2.609	7.758 ¹	409	0	121	10.897
1998	859	1.926	2.785	7.585	434	0	51	10.855
1999	1.078	1.743	2.821	7.592 ²	1.324	889	98	12.724
2000	1.479	1.912	3.391	7.222	537	0	154	11.304
2001	1.293	2.044	3.337	7.018	802	240	199	11.596
2002	1.300	3.178	4.478	6.711	1.411	1.531	392	14.523
2003 ³	689	3.498	4.187	6.881	1.948	5.658	330	19.004

Tabelle 9.1: Einnahmen–Entwicklung
— ohne BRAIN– und KOBV–Serviceanteil —

¹Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

²Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

³voraussichtliches Ist 2003 – vor Prüfung des Jahresabschlusses

Die Entwicklung der Drittmiteleinnahmen — für 2003 voraussichtliche Ist-Zahlen — lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

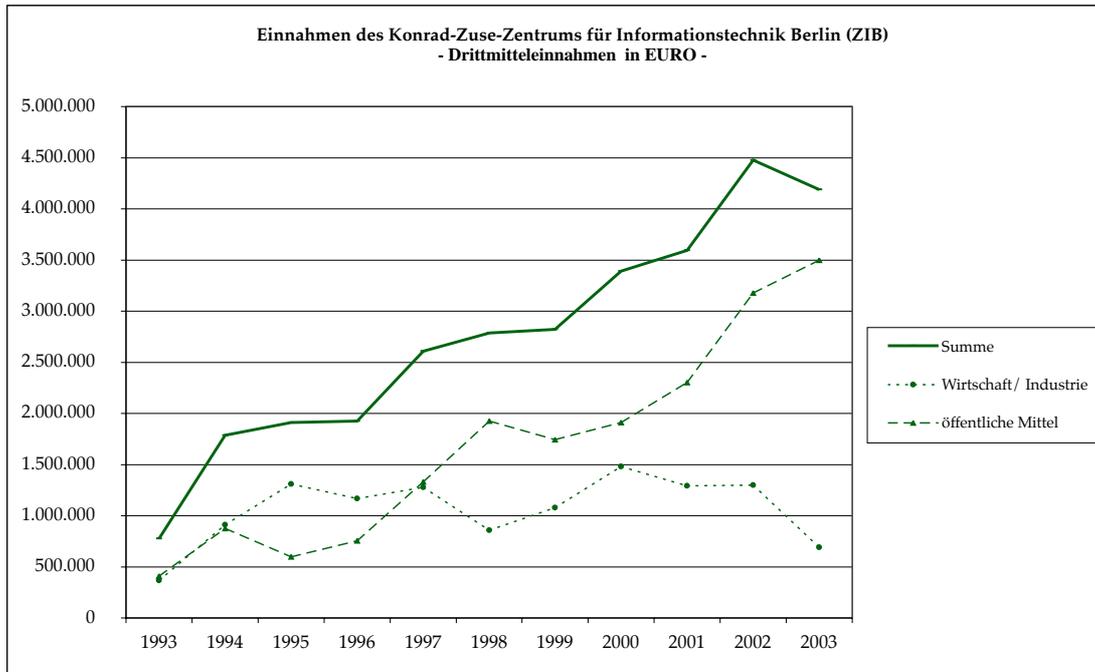


ABBILDUNG 9.1: Drittmittel-Entwicklung

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (80,5 Stellen, — 6 Beamten- und 74,5 Angestelltenstellen — davon 2 Stellen ohne Bezüge und eine 0,5 Stelle durch Wegfallvermerk nicht finanziert) sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die deutlich über dem Durchschnitt liegenden Altersstruktur der unbefristet beschäftigten Belegschaft besteht im Personalhaushalt eine besondere finanzielle Belastung, die bisher durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmiteleinnahmen abgedeckt werden konnte.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.2003	01.01.2004
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	84	89
Servicepersonal	54	49
KOBV-Zentrale	13	14
Studentische Hilfskräfte	42	51
Insgesamt	197	207

ABBILDUNG 9.2: Personal-Entwicklung

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2004 insgesamt 122 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 85 Beschäftigte finanziert.

KAPITEL 10

ANSPRECHPARTNER

Präsident:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard Inhaber des Lehrstuhls <i>Scientific Computing</i> am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin Tel. (030) 841 85 – 101	
Vizepräsident:	Prof. Dr. Martin Grötschel Inhaber des Lehrstuhls <i>Diskrete Mathematik</i> am Institut für Mathematik der Technischen Universität Berlin Tel. (030) 841 85 – 210	
Bereichsleiter Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld Inhaber des Lehrstuhls <i>Praktische Informatik</i> am Institut für Informatik der Humboldt–Universität zu Berlin Tel. (030) 841 85 – 130	
Bereichsleiter Verwaltung:	Henry Thieme Tel. (030) 841 85 – 100	
Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard/ Dr. Martin Weiser	841 85–101 841 85–170
Wissenschaftliche Software:	Dr. Ulrich Nowak	841 85–175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans–Christian Hege, Hon. Prof.	841 85–141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ Dr. Jörg Rambau	841 85–210 841 85–249
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85–173
Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	841 85–130
High Performance Computing:	Hubert Busch	841 85–135
IT Services:	Wolfgang Pyszkalski	841 85–152
Bibliothek:	Regine Kossick	841 85–233

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Takustraße 7,

D-14195 Berlin-Dahlem

Telefon: (0 30) 841 85 – 0 Telefax: (0 30) 841 85 – 125

Internet: <http://www.zib.de>

E-mail: nachname@zib.de