

ZIB

**KONRAD-ZUSE-ZENTRUM
FÜR INFORMATIONSTECHNIK BERLIN**
JAHRESBERICHT 2011

VORWORT

Dies ist der letzte Jahresbericht, für den ich als Präsident des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB) verantwortlich zeichne. Wie in den beiden Jahren zuvor stellen wir unseren interessierten Freunden, Gönnern und aufmerksamen Beobachtern hier nur einige wenige ausgewählte Leuchtturmprojekte im Detail vor. Die Gesamtheit der Projekte, Publikationen und wissenschaftlichen Aktivitäten führen wir nur in Listen auf. Ausführlichere Hintergrund-Informationen finden sich auf unseren Webseiten.

Wie in den Vorjahren war das ZIB wieder in einer Fülle von Projekten aus den Anwendungsschwerpunkten der Mathematik und Informatik aktiv: im Bereich Numerische Analysis und Modellierung z. B. im mathematischen Entwurf von Implantaten, von potentiellen Medikamenten oder von nanooptischen Resonatoren sowie in der systembiologischen Modellierung des weiblichen Zyklus; im Bereich Visualisierung und Datenanalyse z. B. in der Analyse von großen Molekülen bis hin zu Nanotransportern sowie in der Bildanalyse von Materialien; im Bereich Diskrete Mathematik z. B. in der Linienoptimierung im öffentlichen Nahverkehr, der exakten Lösung ganzzahliger Optimierungsprobleme und der energiesensiblen Telekommunikation; im Bereich der wissenschaftlichen Information z. B. in der Dokumentenklassifikation sowie in verschiedenen Hostingprojekten für Bibliotheksanwendungen; im Bereich Informatik z. B. mit den Themen heuristische Suchalgorithmen auf Supercomputern, Datenmanagement im Internet und energieeffizientes Rechnen mit Grafikprozessoren. Die Summe dieser Projekte führte zu einer Einwerbung von Drittmitteln in Höhe von 5.999T EUR, davon 2.204T EUR Industriemittel, nahezu punktgenau auf dem Niveau des Vorjahres.

Wie in den Vorjahren war das ZIB wiederum in zahlreichen Kooperationen mit FU, HU, TU und Charité sowie mit vielen außeruniversitären Forschungseinrichtungen aktiv. Das DFG-Forschungszentrum MATHEON, das vom ZIB gemeinsam mit TU, FU, HU und WIAS getragen wird, ist noch bis Mitte 2014 durch die DFG-Förderung gesichert. Eine strukturell tragfähige Verlängerung über diese Laufzeit hinaus ist weiterhin in der Diskussion zwischen den Universitäten und dem Berliner Senat, wobei seit letztem Jahr sogar zwei Senatsverwaltungen eingebunden sind, nämlich die für Forschung und die für Wissenschaft. Zu welcher der beiden Senatsverwaltungen das ZIB nun bei welcher Frage gehört, ist eine Wissenschaft für sich. Erfolgreiche Verbundprojekte im Bereich „Service“ des ZIB sind weiterhin der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV), das landeseigene Wissenschaftsnetz BRAIN sowie unsere langfristige Datenarchivierung.

Als besonderen Erfolg im Jahr 2011 werten wir die Empfehlung des Wissenschaftsrates zur Beschaffung eines neuen Supercomputers. Er darf wiederum 30 Millionen Euro kosten und soll ab 2013 an den Standorten ZIB/Berlin und RRZN/Hannover für den HLRN-Verbund betrieben werden. Mit dem HLRN-III wird das Erfolgsmodell HLRN-Verbund weitergeführt, seit letztem Jahr endlich auch unter Einbeziehung des Landes Brandenburg.

Der Wissenschaftliche Beirat des ZIB tagte am 4. und 5. Juli 2011. Für 2011 hat er wiederum seine Bewertung verfasst, in der es u. a. heißt: „Das hohe internationale Ansehen des Zuse-Instituts Berlin, begründet auf exzellenten wissenschaftlichen Leistungen und deren Umsetzung für Wirtschaft und Industrie, führt zu herausragenden Leistungen für die Gesellschaft in Form von Ausbildung, Forschung und Transferleistungen.“ Und als letzten Satz: „Dieses Erfolgsrezept muss tradiert werden.“

Berlin, im Mai 2012



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

IMPRESSUM

Herausgegeben vom

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

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

bibliothek@zib.de
www.zib.de

Gestaltung

CB.e Clausecker | Bingel AG, Agentur für Kommunikation

Hintergrundfoto Tafel | Abteilungen

© Gunnar Assmy – Fotolia.com

ISSN: 0934-5892

© 2012 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin





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

INHALT

6	Executive Summary
8	Konrad Zuse – der Namenspatron des ZIB
12	Das Zuse-Institut-Berlin „Schnelle Algorithmen – Schnelle Rechner“
14	Gliederung der wissenschaftlichen Bereiche
16	Organisationsstruktur des ZIB
18	Wirtschaftliche Situation
19	Personelle Entwicklung
20	Organisation
23	Spin-off-Firmen
<hr/>	
26	NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG
30	Variationelle Formanalyse
32	Der Satz von Gauß in der Molekülkinetik
34	Präzise numerische Simulation des nicht-lokalen hydrodynamischen Drude-Modells mit FEM
36	BovCycle: Mathematische Modellierung des Milchkuhzyklus
38	Projekte der Abteilung Numerische Analysis und Modellierung
<hr/>	
40	VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE
44	Wege in Molekülen und Multiskalen – Visualisierung biologischer Strukturen
46	Bildanalyse in der zerstörungsfreien Werkstoffprüfung
48	Wärmeleitungskern: Signatur zur Multiskalenvisualisierung von Tensorfeldern
50	„Richtig in Form“ – Mathematische Formanalyse
52	Projekte der Abteilung Visualisierung und Datenanalyse
<hr/>	
54	OPTIMIERUNG
58	Linienoptimierung in Potsdam
60	Exakte ganzzahlige Optimierung
62	Energiesensible Telekommunikation
64	CPAIOR 2011
66	Projekte der Abteilung Optimierung
<hr/>	
68	WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION
72	Klassifikation und Ähnlichkeitsanalyse mathematischer Publikationen
74	ISMP 2012 in Berlin
76	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
78	Projekte der Abteilung Wissenschaftliche Information und KOBV
<hr/>	
80	PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME
84	„First we take Berlin...“ – Das Online-Archiv zu „24h Berlin“
88	Effiziente Nutzung großer Shared-Memory-Systeme
90	Eine kompakte symbolische Repräsentation von Zeitreihen
92	Projekte der Abteilung Parallele und Verteilte Systeme
<hr/>	
94	SUPERCOMPUTING
96	Der HLRN-II-Supercomputer am ZIB
98	HLRN-Fachberatung
100	BRAIN – Das Berliner Wissenschaftsnetz
<hr/>	
102	IT-SERVICE
104	IT-Service
106	Zentrale Datenhaltung im Zuse-Institut Berlin
<hr/>	
108	FAKTEN UND ZAHLEN
111	Wissenschaftliche Nachwuchsförderung am ZIB
112	Auszeichnungen und Rufe
113	Publikationen
121	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern und -Mitarbeiterinnen
135	Tagungen und Gäste am ZIB
138	Software und Service



ALLGEMEINER TEIL

EXECUTIVE SUMMARY

KONRAD ZUSE – DER NAMENSPATRON DES ZIB

DAS ZUSE-INSTITUT BERLIN

GLIEDERUNG DER WISSENSCHAFTLICHEN BEREICHE

ORGANISATIONSSTRUKTUR DES ZIB

WIRTSCHAFTLICHE SITUATION

PERSONELLE ENTWICKLUNG

ORGANISATION

SPIN-OFF-FIRMEN

EXECUTIVE SUMMARY

FAST ALGORITHMS – FAST COMPUTERS

After more than twenty years of existence, ZIB has become an international trademark. Driven by challenging applications from science and engineering, economy, or information technology – preferably at the present border of computational complexity – our focus is on the theoretical derivation and practical development of efficient algorithms and their analysis. Our pride is in superceding the technological speed-up of computers by the computational speed-up through our algorithms – and, eventually, in adding both of them. In the best spirit of our namesake Konrad Zuse we do not cultivate any segregation between mathematics and computer science: On its top level, our structure is divided into Numerical Mathematics, Discrete Mathematics, and Computer Science – each headed by a professorship fully integrated into FU, TU, or HU. In each of these areas we develop fast algorithms applicable and actually applied in hard real-life problems. In a bunch of collaborative joint projects, ZIB understands its role as an honest enabler aiming at a win-win situation with our partners. Perhaps the most visible one among these projects is the DFG Research Center MATHEON, where ZIB is one of the supporting institutions (the others being the TU, FU, HU mathematics faculties, and WIAS); its prolongation beyond the end of the DFG support in mid 2014 is presently still under discussion.

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

NUMERICAL MATHEMATICS

This area divides into the departments “Numerical Analysis and Modelling”, and “Visualization and Data Analysis”.

From Numerical Analysis and Modelling we selected the following highlights this year: (a) the surprising application of the theorem of Gauß in high spatial dimensions, which resulted in a drastic reduction of computational complexity of our conformation dynamics approach bringing genuine drug design into reach (patents pending); (b) the precise numerical simulation of nano-wires by means of a non-local Drude model, which explains a spectral shift and additional resonances actually observed in experiments; (c) the mathematical modelling and efficient simulation of the bovine cycle; the bovine model is much smaller than our previous human model, but nevertheless nicely covers the two or three cycles observed in cows; (d) a new approach to the challenging correspondence problem that arises in both computational anatomy and computer vision, called “Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping” (LDDMM); this project bridges to the department “Visualization and Data Analysis”, in particular to the research group Medical Planning.

From “Visualization and Data Analysis” we selected the following ones: (a) a new approach to efficiently compute potential paths of small molecules in large molecular structures, e.g. of drug molecules in nanoscopic objects, complemented by a visualization that bridges atomic and biological length scales; (b) practically successful methods for analysis of CT image data in materials science, e.g. for analysis of the pore space of soil and asphalt as well as cracks in concrete; (c) new methods for comparison and multi-scale visualization of surfaces and tensor fields on the basis of the heat kernel signature; (d) new methods for analysis, comparison and visualization of shapes, utilizing data analysis techniques in high-dimensional shape spaces.

DISCRETE MATHEMATICS

The departments Optimization and Scientific Information carry out mathematical research and service projects to promote scientific computing and solve important and mathematically difficult problems arising in management, business, planning, and engineering.

The line planning methodology for public transport developed in the working group (WG) Traffic and Logistics has entered practice and is now in use in Potsdam. This WG participated in the acquisition of the new Collaborative Research Center Sustainable Manufacturing – Shaping Global Value Creation (SFB 1026) in collaboration with several engineering institutes of TU Berlin, BAM, IPK, and WZB. Starting in 2012, this will establish a strong and new link to a highly relevant application area in production planning.

The WG Linear and Nonlinear Integer Optimization significantly increased the performance of the codes of the ZIB Optimization Suite (e.g., via parallelization, and for exact solutions) and hosted the CPAIOR 2011 conference with more than 150 participants from 19 countries. The WG Telecommunication is engaged in novel projects with particular focus on energy efficiency in telecom networks, and has acquired a new project featuring multicriteria optimization methods in optical network planning, starting in 2012. The results of the FTTx project, completed in 2011, are now employed at Deutsche Telekom to bring “Fiber To The Home”.

Our largest industry projects deal with various aspects of energy management and give rise to unprecedented challenges. We aim here at solving optimization problems that integrate discrete, continuous, and stochastic features. Due to the importance of this area we will establish a new working group dedicated to energy in the beginning of 2012.

The department Scientific Information continues the development of its highly esteemed support of the libraries in Berlin, Brandenburg, and beyond and of the many museums relying on ZIB’s IT tools. We report this year about our classification efforts that are based on machine learning and similarity analysis which are aimed at the support search activities based on metadata.

COMPUTER SCIENCE

This area divides into the Parallel and Distributed Systems research group, the High-Performance Computing group which runs the HLRN supercomputer and the BRAIN metropolitan area network, and the IT Services group which provides services for long-term data archival and inhouse computation and communication.

From the work of the Parallel and Distributed Systems group, we present three research highlights this year. The first one is the distributed, scalable file system XtreamFS with its unique lease negotiation algorithm. The leases keep the replicated metadata available and consistent, even under harsh conditions with crashing servers. The robustness of XtreamFS was demonstrated in the project “First we take Berlin...”. 700 hours of digital film content are provided by fault tolerant XtreamFS servers for public Internet access. As a second highlight we present a study on the deficiencies of memory allocators in large shared-memory supercomputers and, of course, we also present measures on how to overcome these deficiencies. The third highlight is a new algorithm for time series analysis, which becomes increasingly important for finding similarities in scientific data in biochemistry, astronomy, climate research, biomedicine or marketing. Our SFA algorithm, a Symbolic Fourier Approximation and index for similarity search in high-dimensional datasets greatly speeds up the search by reducing the number of dimensions and by fast indexing schemes.

For the users of our supercomputer the most important highlight was the decision of the Wissenschaftsrat to establish a followup system to our current supercomputer. We expect the new “HLRN-III” to boost the available computing performance by an order of magnitude in the fall of 2013.

KONRAD ZUSE – DER NAMENSPATRON DES ZIB

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



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

BERUFUNG ZWISCHEN KUNST UND TECHNIK

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

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

COMPUTERBAU IM WOHNZIMMER

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

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

KONRAD ZUSE ALS UNTERNEHMER

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

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

DER KÜNSTLER KUNO SEE

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



Konrad Zuse erhielt zahlreiche Würdigungen, u. a. wurden ihm das Bundesverdienstkreuz sowie im Jahre 1995 das Große Bundesverdienstkreuz mit Stern und Schulterband, zahlreiche Ehrendokortitel und zwei Ehrenprofessuren verliehen. Er erlebte die Vorplanungen für den Neubau des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin noch mit, ein Jahr nach seinem Tod wurde das neue Gebäude in Berlin-Dahlem eingeweiht.

Quellen

Konrad Zuse: **Der Computer: Mein Lebenswerk**. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 1984.

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

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

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

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

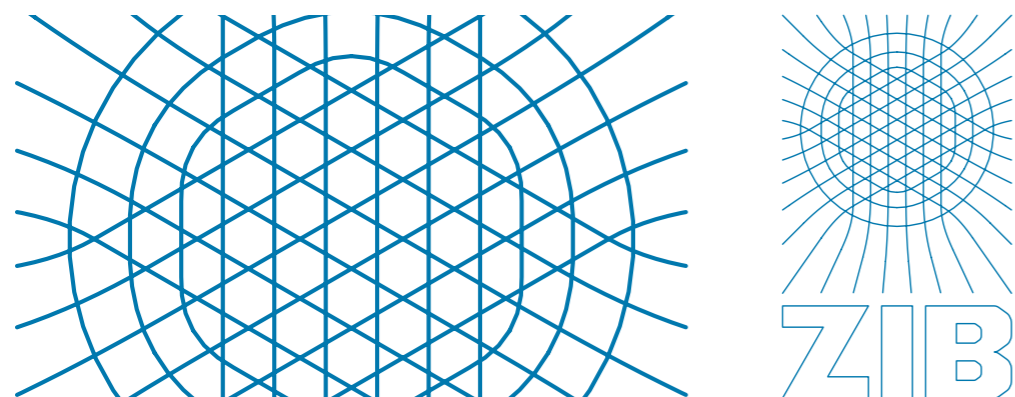
Clemens Kieser: **„Ich bin zu faul zum Rechnen“ – Konrad Zuses Computer Z22 im Zentrum für Kunst und Medientechnologie Karlsruhe**. In: Denkmalpflege in Baden-Württemberg, 4/34/2005, Esslingen am Neckar, S. 180–184.

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

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

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

DIE GESCHICHTE DES ZIB-LOGOS



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

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

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

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

Sein genialer Entwurf hat für das ZIB heute vier Bedeutungen:

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

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

ZUSES WERK WEITERDENKEN

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

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

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

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

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

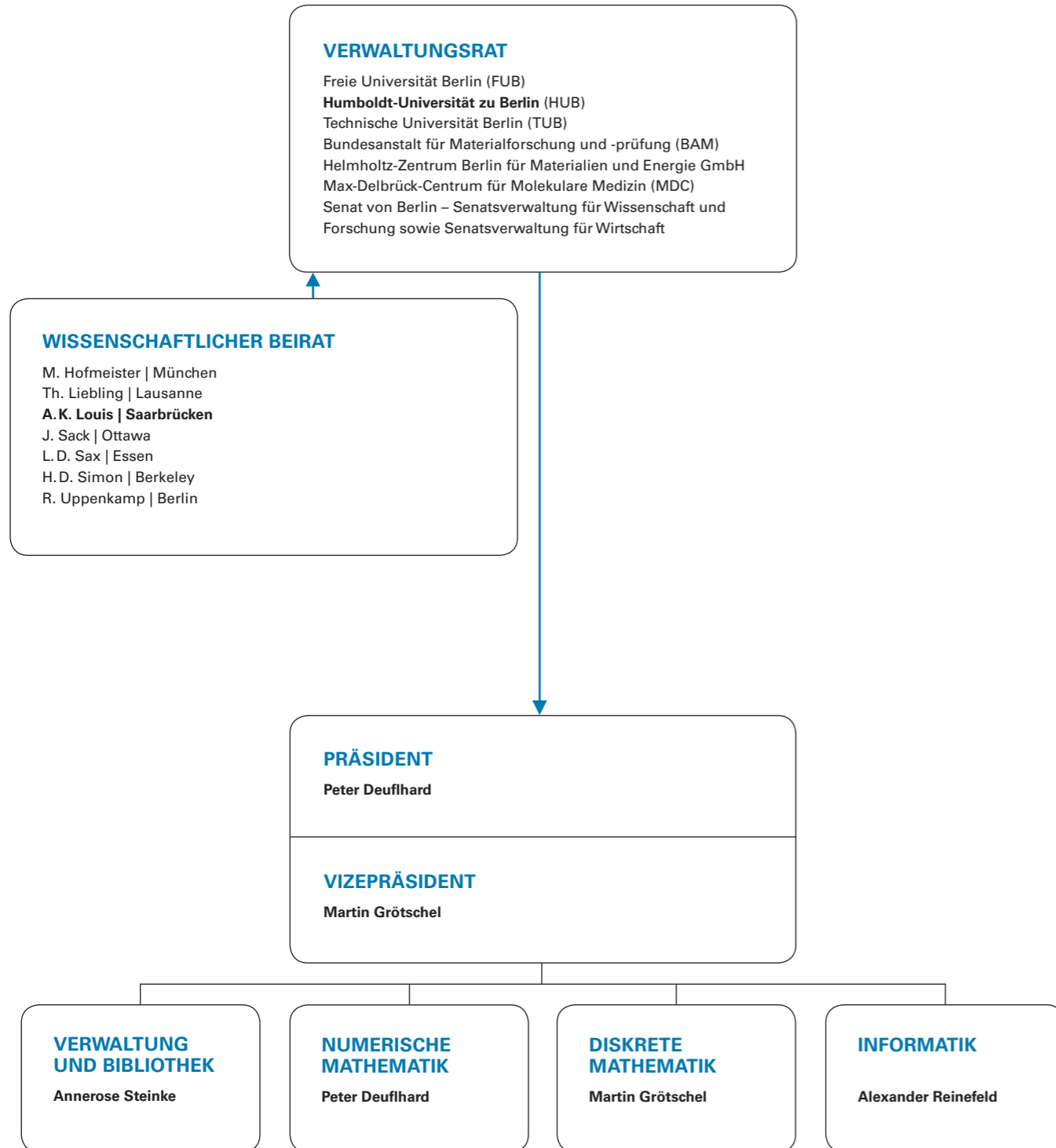
Zuse entwickelte zuerst den Computer, das mechanische Gehirn, dann wandte er sich den Programmiersprachen zu. Mit dieser Innovation entstand schließlich auch die Mathematik der Lösungsmethoden. Zuerst in den angelsächsischen Ländern, später auch in Deutschland – der mathematische Gehalt wird nun an praktischer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

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

¹ Konrad Zuse: Der Computer: Mein Lebenswerk. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 1984, S. 10.

DAS ZUSE-INSTITUT-BERLIN „SCHNELLE ALGORITHMEN – SCHNELLE RECHNER“

ORGANISATIONSSTRUKTUR DES ZIB



STRUKTUR UND ZIELE

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

FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG

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

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

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

ANWENDUNGSORIENTIERTE FORSCHUNG UND KOOPERATIONEN

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

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

SUPERCOMPUTING

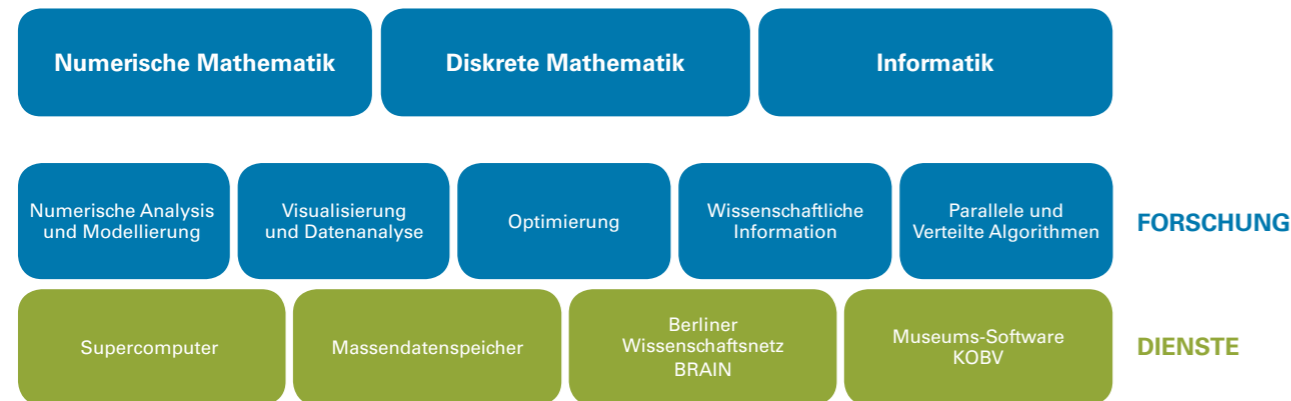
Das ZIB betreibt in Berlin im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen in Norddeutschland ein Hochleistungsrechnersystem. Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Die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

LANGFRISTIGE DATENHALTUNG ALS DIENSTLEISTUNG

Für die Arbeiten im ZIB und zur Nutzung durch andere wissenschaftliche Einrichtungen betreibt das ZIB ein modernes Speichersystem. Die Server des Instituts ermöglichen den Zugriff auf etwa ein Petabyte Plattenspeicher. Als Erweiterung des Plattenspeichers dient ein Bandarchiv zur Langzeitspeicherung. Dieses Archiv ist ein schnelles „Hochregallager“ für Bandkassetten, die auf Anforderung der Server durch Roboter in die Bandlaufwerke geladen werden. Die Server sorgen automatisch dafür, dass sich auf dem Plattenspeicher immer die aktuell benutzten Daten befinden.

GLIEDERUNG DER WISSENSCHAFTLICHEN BEREICHE

Im Jahr 2011 wurden die Abteilungen und Arbeitsgruppen der Bereiche entsprechend den aktuellen Forschungsschwerpunkten neu gegliedert wie folgt:



NUMERISCHE MATHEMATIK

Der Bereich Numerische Mathematik gliedert sich in zwei Abteilungen:

- Numerische Analysis und Modellierung
- Visualisierung und Datenanalyse

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

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

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

- Visualisierungsalgorithmen
- Visualisierungssysteme
- Medizinische Planung
- Vergleichende Visualisierung

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

DISKRETE MATHEMATIK

Der Bereich Diskrete Mathematik gliedert sich in die Abteilungen:

- Optimierung
- Wissenschaftliche Information

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

- Verkehr und Logistik
- Lineare und Nichtlineare Ganzzahlige Optimierung
- Telekommunikation
- Energie (in Planung)

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

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

INFORMATIK

Der Bereich Informatik untergliedert sich in die Abteilungen:

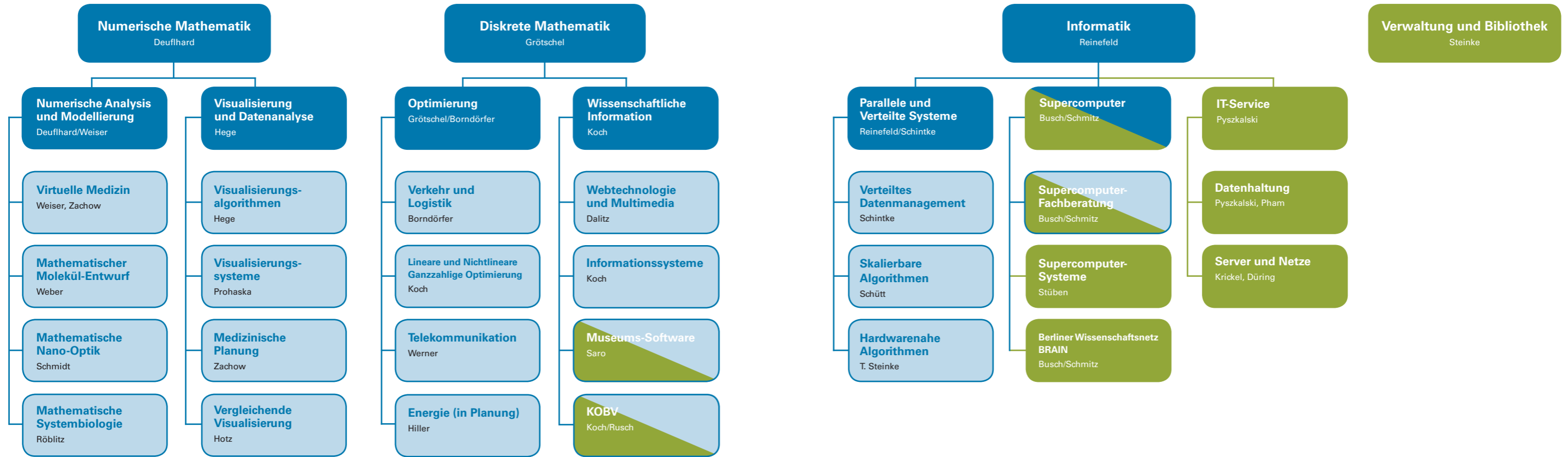
- Parallele und Verteilte Systeme
- Supercomputing
- IT-Service

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

Zu den Hauptaufgaben der Abteilung Supercomputing gehören Auswahl, Bereitstellung und Betrieb von Hochleistungsrechnerkapazität sowie die fachliche Beratung der Anwender zur effizienten Nutzung der Systeme, insbesondere bei Neuentwicklungen und Anpassungen der Codes an die spezifischen Eigenschaften der im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) betriebenen Systeme. Die Abteilung koordiniert auch das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN und betreut den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN. Aufgabe der Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen der Abteilung IT-Service ist es, die Forschungsarbeiten im ZIB durch Planung, Beschaffung und Wartung der Ausstattung mit Software und Hardware zu unterstützen. Hierzu zählen sämtliche im Haus betriebenen Arbeitsplatzsysteme, Server, Netzkomponenten, Peripheriegeräte sowie Web- und Mail-Services. Ferner berät und betreut die Abteilung die Nutzer der langfristigen Datenhaltung im Haus. Diesen Service stellt das ZIB seit 2009 auch externen wissenschaftlichen Einrichtungen zur Verfügung.

ORGANISATIONSSTRUKTUR DES ZIB

ORGANIGRAMM



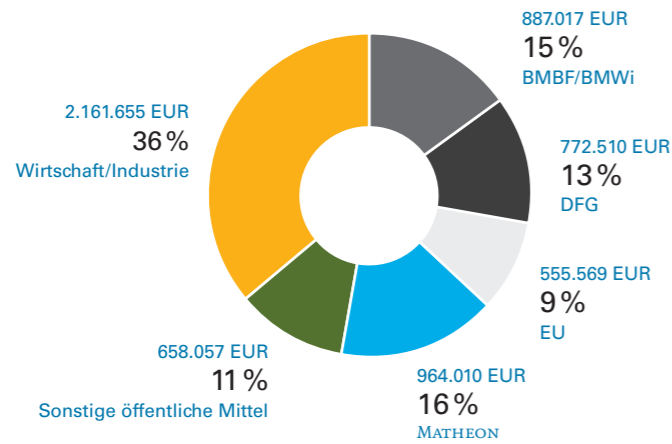
AM ZIB ARBEITEN FORSCHUNG UND SERVICE ENG ZUSAMMEN.

Im Jahr 2011 wurden die Abteilungen und Arbeitsgruppen der Bereiche entsprechend den aktuellen Forschungsschwerpunkten gegliedert.

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

WIRTSCHAFTLICHE SITUATION

DRITTMITTELEINNAHMEN ZIB NACH HERKUNFT:



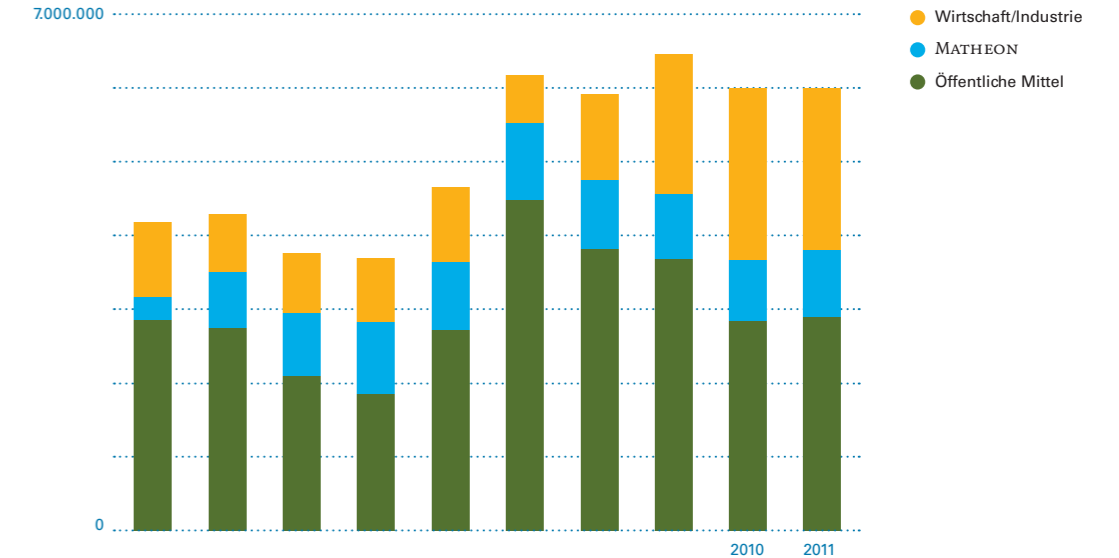
Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) finanziert seine wissenschaftliche Arbeit vor allen aus drei Quellen: der Grundfinanzierung des Landes Berlin, aus eingeworbenen Drittmitteln öffentlicher Träger sowie aus Industriekooperationen. Das ZIB konnte auch im Jahr 2011 sein hohes Niveau bei der Akquisition von Industrieprojekten und öffentlichen Projekten halten. Im Jahre 2011 stieg die Finanzierung des Instituts aus öffentlichen Mitteln leicht an und der Anteil der Drittmittelprojekten geht im Vergleich zum Vorjahr minimal zurück.

Trotz wirtschaftlich schwieriger Zeiten konnte das ZIB wieder interessante Forschungsprojekte akquirieren und bleibt ein gefragter Kooperationspartner für große und mittelständische innovative Unternehmen. Die Arbeit der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler wurde im Jahr 2010 zu ca. 67% aus Drittmitteln finanziert. Der Personalbestand im ZIB blieb insgesamt nahezu unverändert, im Jahr 2011 arbeiteten 236 Personen am ZIB (234 Personen in 2010). Auch in 2011 musste das Institut große Anstrengungen unternehmen, exzellente Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen für den Standort Berlin zu begeistern, da zum einen immer weniger gut ausgebildete Mathematiker/innen und Informatiker/innen auf dem Markt zur Verfügung stehen und zum anderen die Gehälter der Angestellten des Öffentlichen Dienstes in Berlin auch nach der Tarifumstellung auf den TV-L immer noch deutlich unter denen der anderen Bundesländer liegen.

Diesen Wettbewerbsnachteil konnte das ZIB ausgleichen durch seinen guten Ruf in der Community, durch anspruchsvolle Projekte, gute Betreuung und hervorragende Teamarbeit, die jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern ein Sprungbrett sowohl für die Karriere im wissenschaftlichen Bereich als auch in der Industrie bietet. Der Ausbau des Hochleistungsrechners der Norddeutschen Länder HLRN-II wurde bereits in 2010 vollständig abgeschlossen, das Nachfolgemodell HLRN-III wurde genehmigt und wurde im Frühjahr 2012 ausgeschrieben. Im Sommer 2013 wird er ans Netz gehen. Die langfristige Datenhaltung des Instituts wurde weiter ausgebaut, zahlreiche neue Forschungskoperationen konnten in diesem Bereich abgeschlossen werden.

Das Land Berlin bewilligte 2010 einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss in Höhe von 7.305 TEUR (ohne BRAIN und KOBV-Anteile), der investive Bereich des ZIB wurde mit 435 TEUR unterstützt. Die Drittmiteleinahmen aus öffentlichen Projekten und aus Industrieprojekten in Höhe von 5.999 TEUR in 2011 lagen annähernd auf dem gleichen Niveau wie in 2010 (5.992 TEUR). Die Industriemittel lagen in 2011 mit 2.162 TEUR nur unwesentlich unter den Erträgen von 2010 (2.204 TEUR). Herausgerechnet und an dieser Stelle nicht erfasst wurden selbstverständlich alle Mittel, die im Zuge von Projektkooperationen an Forschungspartner weitergegeben wurden. Besonders betont werden soll an dieser Stelle, dass sich die Drittmiteleinahmen aus dem Industriebereich damit im dritten Folgejahr auf einem erfreulich hohen Niveau verstetigt haben.

DRITTMITTELEINNAHMEN IN EUR:



PERSONELLE ENTWICKLUNG

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter in Höhe von 80,5 Stellen sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die Umstellung des Tarifsystems auf TV-L und die jährlichen Tarifsteigerungen besteht im Haushalt des ZIB eine besondere Belastung im Bereich der unbefristet Beschäftigten, die auch im Jahr 2011 durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und die Zuführung von Einnahmen aus Drittmittelprojekten abgedeckt werden musste. Im Jahr 2011 wurden 236 Personen am ZIB beschäftigt. Finanziert wurden die zusätzlichen, nicht im Stellenplan des ZIB geführten Mitarbeiter/innen ausschließlich über Drittmittelprojekte.

ZAHL DER BESCHÄFTIGTEN ZUM 01.01.2012 IM VERGLEICH ZUM VORJAHR:

	01.01.11 davon			01.01.12 davon		
	gesamt	unbefristet	befristet	gesamt	unbefristet	befristet
Leitung	4	4	0	4	4	0
Wissenschaftler	112	20	92	107	19	88
Service-Personal	41	36	5	47	39	8
KOBV-Zentrale	12	7	5	15	7	8
Student. Hilfskräfte Auszubildene	65	0	65	63	0	63
Total	234	67	167	236	69	167

ORGANISATION

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

ORGANE

Organe des ZIB sind der Präsident und der Verwaltungsrat.

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

Der Verwaltungsrat setzte sich 2011 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Michael Linscheid, HUB, Vorsitzender bis 02.02.2011
- Prof. Dr. Peter Frensch, HUB, Vorsitzender ab 02.02.2011
- Prof. Dr. Ulrike Woggon, TUB, stellvertretende Vorsitzende bis 29.06.2011
- Prof. Dr. Paul Uwe Thamsen, TUB, stellvertretender Vorsitzender ab 17.10.2011
- Prof. Dr. Jochen Schiller, FUB, bis 02.02.2011
- Prof. Dr. Brigitta Schütt, FUB, ab 02.02.2011
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Frauen
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Anke Kaysser-Pyzalla, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (HMI)
- Prof. Dr. Nikolaus Rajewsky, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 02.02.2011, am 29.06.2011 und am 17.10.2011.

SATZUNG

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

WISSENSCHAFTLICHER BEIRAT

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

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

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 04. und 05.07.2011 im ZIB.

MITGLIEDSCHAFTEN

Das ZIB ist Mitglied in folgenden Organisationen:

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

ZIB-FELLOWS

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2011 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

SENIOR-FELLOWSHIP

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

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

JUNIOR-FELLOWSHIP

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

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

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

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

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

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

SELBSTVERWALTUNG

Der Personalrat des ZIB setzt sich wie folgt zusammen:

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

FRAUENVERTRETUNG

Uta Kaminsky
Kathrin Peter (bis 31.10.2011)

SPIN-OFF-FIRMEN

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

Computing in Technology GmbH (CIT) | 1992 | www.cit-wulkow.de
Modellierung und Entwicklung von numerischer Software für die technische Chemie

RISK-CONSULTING Prof. Dr. Weyer GmbH | 1994 | www.risk-consulting.de
Database Marketing für Versicherungen

Intranetz GmbH | 1996 | www.intranetz.de
Softwareentwicklung für Logistik, Database Publishing, eGovernment

AktuarData GmbH | 1998 | www.aktuardata.de
Entwicklung und Vertrieb von Risikobewertungssystemen zur Krankenversicherung

Visage Imaging GmbH (hervorgegangen aus dem Spin-Off Indeed-Visual Concepts GmbH) | 1999 | www.visageimaging.com
Visualisierung und Datenanalyse (**Amira** etc.), Medizinische Visualisierung (RIS=Radiology Information System, PACS=Picture Archiving and Communication System), Virtual Reality System Integration (früher)

atesio GmbH | 2000 | www.atesio.de
Entwicklung von Software und Dienstleistungen für die Planung, Konfiguration und Optimierung von Telekommunikationsnetzen

bit-side GmbH | 2000 | www.bit-side.com
Mobiltelefon-Anwendungen, Visualisierung

Dres. Löbel, Borndörfer & Weider GbR | 2000 | www.lbw-berlin.de
Optimierung und Unternehmensberatung im ÖPNV

Lenné3D GmbH | 2005 | www.lenne3d.com
3D-Landschaftsvisualisierung, Softwareentwicklung und Dienstleistungen

JCMwave GmbH | 2006 | www.jcmwave.com
Simulationssoftware für optische Komponenten

onScale solutions GmbH | 2006 | www.onscale.de
Softwareentwicklung, Beratung und Dienstleistungen für parallele und verteilte Speicher- und Rechnersysteme

molConcept GmbH | 2008 | www.molconcept.com
Mathematische Konzepte für molekulares Design, Softwareentwicklungen für den computergestützten Wirkstoffentwurf

Laubwerk – Digital Botany | 2009 | www.laubwerk.com
Erstellung von digitalen Pflanzenmodellen

1000shapes GmbH | 2010 | www.1000shapes.com
Statistische Formanalyse

TASK – Berthold Gleixner Heinz Koch Gbr | 2010
Verbreitung, Wartung und Beratung zur ZIB Optimization Suite



FORSCHUNG

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

OPTIMIERUNG

WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

SUPERCOMPUTING

IT-SERVICE

Milchtafel

Mo- nat	Kühe in Milch	ermolken in Litern				Käl- ber	Haus- halt	Mol- kerei	Stall- Melk- Ø
		tr. trock.	morg.	mitt.	abend.				
1.	10.11.13	4,07		3,77		2.840			
2.	10.08.7								
3.	10.3.5.3	4,01		3,75		2.350			
4.	10.4.1.3								
5.	10.3.9.5								
6.	10.2.5.5								
7.	10.1.1.1								



NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG



$$\begin{aligned} \nabla \times \mu_0^{-1} (\nabla \times E) - \omega^2 \epsilon_0 \epsilon_{loc} E &= i\omega J_{HD} \\ \beta^2 \nabla (\nabla \cdot J_{HD}) + \omega(\omega + i\gamma) J_{HD} &= i\omega \omega_p^2 \epsilon_0 E \end{aligned}$$

NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

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

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/numerik.html

MISSION

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

STRUKTUR

Die Abteilung gliedert sich derzeit in vier Arbeitsgruppen (AGs), jeweils geleitet von Nachwuchswissenschaftlern:

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

AUSZEICHNUNGEN UND RUFE

Anton Schiela hatte im WS 2010/11 eine Gastprofessur an der Universität Hamburg inne; im Januar 2012 ist er als Nachwuchsgruppenleiter an die TU gewechselt.

VIRTUELLE MEDIZIN

Das Anfang 2011 herausgekommene Lehrbuch „Numerische Mathematik 3. Adaptive Lösung partieller Differentialgleichungen“ ist in der

akademischen Community gut aufgenommen worden. Deshalb haben wir im Berichtszeitraum diese Auflage überarbeitet und erweitert sowie ins Englische übersetzt; sie wird im September 2012 als DeGruyter-Textbook „Adaptive Numerical Solution of PDEs“ erscheinen. Ein 70-seitiger Überblicksartikel über Mathematik in der Krebstherapie Hyperthermie wurde von der Zeitschrift Acta Numerica erbeten, er wird in der Ausgabe 2012 erscheinen. Für eine leicht verbesserte Version des von uns vorgeschlagenen kontaktstabilisierten Newmark-Algorithmus zur Integration dynamischer Kontaktprobleme konnte durch Einführung der diskreten physikalischen Energienorm nun endlich der Beweis erbracht werden, warum unser Verfahren in der Praxis soviel besser abschneidet. Für das Korrespondenzproblem, das sowohl in der computergestützten Anatomie als auch in der Computer Vision auftritt, konnte in enger Kooperation mit der AG „Medizinische Planung“ in der Abteilung „Visualisierung und Datenanalyse“ mit „Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping“ (LDDMM) ein neuer algorithmischer Zugang ausgearbeitet werden. Unsere Arbeiten an der Kompression von Trajektorien haben 2011 im Kontext von adaptiven hierarchischen Gittern zum ersten Mal die volle Komplexitätsreduktion erzielen können (Kompressionsrate 40, Kooperation AG Polthier). Ein von ZIB und Charité gemeinsam getragenes Patent im Bereich Kniegelenksdynamik konnte im Berichtszeitraum an eine Firma verkauft werden.

MATHEMATISCHER MOLEKÜL-ENTWURF

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten bzgl. Konformationsdynamik im Rahmen des an der FU Chemie angesiedelten SFB 765¹ äußerst erfolgreich fortgesetzt (mit nunmehr zwei DFG-Stellen statt einer in der ersten Förderperiode). Darüber hinaus wurde ein neues Projekt mit

dem Fritz-Haber-Institut (AG Scheer, MPG) begonnen, in dem eine Erweiterung der Konformationsdynamik auf hybride quantenmechanisch/klassische Dynamik zugrundegelegt wurde. In einem bundesweiten Verbundprojekt, u. a. mit der BfG², gelang eine Charakterisierung der Östrogenität von Stoffen im Trinkwasser, ein wichtiger Beitrag zum Umweltschutz. Als vorläufiger Endpunkt einer langen Entwicklung wurde ein am ZIB entworfenes neuartiges Schmerzmittel sowie die von uns dazu entwickelte mathematische Methode zum Patent angemeldet. Dieses Medikament auf Morphin-Basis (keine Designerdroge!) unterdrückt Entzündungsschmerzen, indem es periphere Opioid-Rezeptoren selektiv adressiert; dabei werden unerwünschte Nebenwirkungen wie Schläfrigkeit oder Suchtgefahr vermieden.

MATHEMATISCHE NANO-OPTIK

Im Berichtszeitraum hat sich der inhaltliche Schwerpunkt der AG mehr und mehr auf die Konstruktion von Solarzellen verlagert. Unter dem Eindruck der Energiewende, die von der Bundesregierung ausgerufen worden ist, kommt unseren weltweit anerkannten Algorithmen nun plötzlich und deutlich die Rolle einer Schlüsseltechnologie zu. So hat sich das Verbundprojekt DEMO14 zum Ziel gesetzt, relativ kostengünstige Si-Dünnschicht-Solarzellen mit 14% Zellwirkungsgrad zu entwickeln, im wesentlichen durch das Ausreizen der Optik rauer Oberflächen, wobei zunehmend Methoden der Statistik hereinspielen. Im Rahmen des Verbundprojektes PVcomB³ sollen periodische Si-Strukturen optimiert werden (Kooperation HZB⁴, AG Rech). Des weiteren erwähnenswert sind die Kooperationsprojekte in dem TU-Sonderforschungsbereich 787⁵, dem DFG-Schwerpunktprogramm 1391⁶ sowie seit letztem Jahr die neu etablierte Kooperation mit der ETH

Zürich (AG Norris), die sich ebenfalls mit der Optimierung des Optik-Teils von Solarzellen beschäftigt. Daneben haben wir auch rein theoretische Fortschritte erzielt, die sich in zwei Dissertationen niedergeschlagen haben.

MATHEMATISCHE SYSTEMBIOLOGIE

Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt nach wie vor auf der mathematischen Modellierung des Hormonzyklus sowohl beim Menschen als auch beim Rind. Das Projekt mit der Firma Pfizer wurde erfolgreich mit einer gemeinsamen Publikation abgeschlossen, in der das gegenüber früher deutlich reduzierte Human-Modell nun öffentlich zugänglich ist. Das Zyklusmodell beim Rind ist sehr viel einfacher, beschreibt jedoch das alternative Muster von zwei oder drei follikularen Wellen qualitativ korrekt und erklärt experimentelle Synchronisationsprotokolle. Alle Simulationen sowie die Parameteridentifikationen wurden mit unserer Software BioPARKIN gerechnet, die seit 2011 öffentlich zum Download zur Verfügung steht. Mitglieder der AG haben im WS 2011/12 eine Vorlesung „Numerical methods for systems biology“ an der FU angeboten, die von den Studierenden sehr gut angenommen worden ist. Auf dieser ermutigenden Basis ist eine Monographie zu diesem Thema geplant.

¹ SFB 765: Multivalenz als Organisations- und Wirkprinzip

² BfG: Bundesanstalt für Gewässerkunde ³ Kompetenzzentrum Dünnschicht- und Nanotechnologie für Photovoltaik Berlin ⁴ HZB: Helmholtz-Zentrum Berlin ⁵ SFB 787: Halbleiter-Nanophotonik ⁶ SPP 1391: Ultrafast Nanooptics

VARIATIONELLE FORMANALYSE

Bearbeitet von: Andreas Günther, Hans-Christian Hege, Malik Kirchner, Hans Lamecker, Martin Weiser

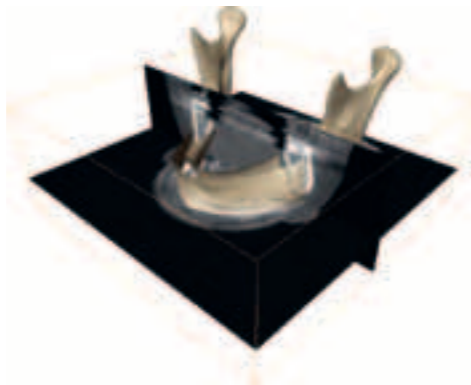
Kooperation: 1000shapes GmbH (spin-off), Xavier Pennec (INRIA, Sophia Antipolis)

Förderung: DFG Forschungszentrum MATHEON (Projekt F2)

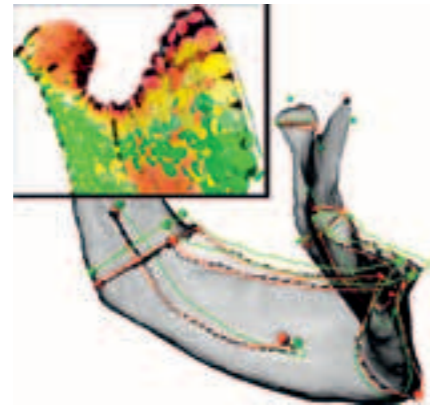
Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/formkorrespondenz

In der Medizin werden häufig bildgebende Verfahren wie Röntgen, Magnetresonanztomographie (MRT) oder Computertomographie (CT) zur Operationsplanung angewendet, wobei die anatomischen Strukturen aus den Bilddaten extrahiert werden müssen (Abb. 1). Diese Segmentierung ist ein sehr aufwändiger manueller Prozess. Automatische Segmentierungsverfahren müssen zur Erkennung der relevanten Strukturen in verrauschten, teilweise unvollständigen Bilddaten Vorwissen über die zu erwartenden Formen mitbringen, etwa mit Hilfe statistischer Formmodelle. Diese beschreiben durch eine niederdimensionale Mannigfaltigkeit die wesentlichen in der Population auftretenden Formvariationen.

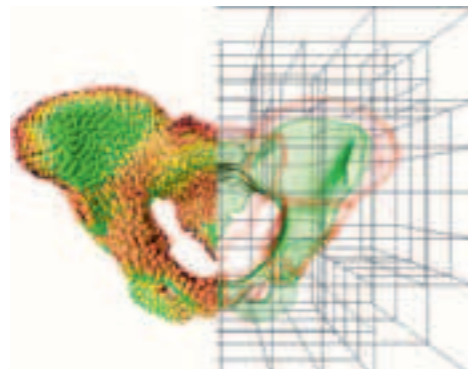
Zum Aufbau eines solchen Formmodells müssen manuell segmentierte Trainingsdaten sinnvoll auf eine gemeinsame Referenzgeometrie abgebildet werden (Korrespondenzproblem). In enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Medizinische Planung wurden zur Lösung des Korrespondenzproblems LDDMM-Methoden untersucht (Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping), die die Korrespondenz zweier in den \mathbb{R}^3 eingebetteten Formen durch eine Deformation des Raumes beschreiben¹. Dabei werden die Formen durch lineare Funktionale auf glatten Vektorfeldern dargestellt (Currents²) und als Summen von Dirac-Funktionalen diskretisiert, was eine effiziente Berechnung von Ähnlichkeitsmaßen durch Normen in Hilberträumen mit reproduzierendem Kern ermöglicht. Die Raumdeformation ist durch die Evolution entlang eines orts- und zeitabhängigen Vektorfelds (Wind) parametrisiert. Wesentliche Vorteile gegenüber den zuvor betrachteten intrinsischen Abbildungen sind die einfache Initialisierung, die Möglichkeit, Flächen und Landmarken simultan zu berücksichtigen, sowie die Robustheit gegenüber kleineren Topologieänderungen.



◀ Abb. 1:
Segmentierung eines Unterkieferknochens einschließlich seines Nervs aus 3-dimensionalen CT-Bilddaten.



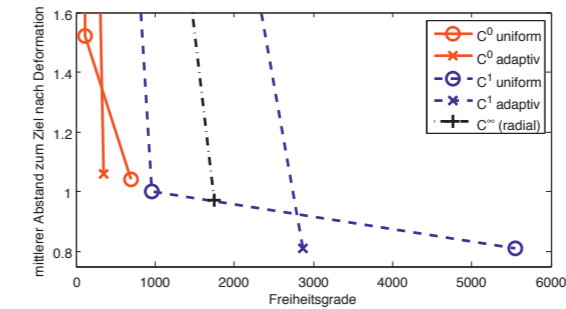
◀ Abb. 2:
Einheitliches Konzept zur Registrierung von Punkten, Linien, Oberflächen und Volumen durch räumliche Deformation.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Zur Erstellung statistischer Formmodelle für die Segmentierung medizinischer Bilddaten müssen verschiedene Formen aufeinander abgebildet werden. In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Medizinische Planung entwickeln wir flexible und effiziente Algorithmen zur Lösung dieses Korrespondenzproblems. Dazu werden LDDMM-Konzepte eingesetzt. Wir entkoppeln die Diskretisierung von Formen und Raumdeformation und ermöglichen dadurch adaptive Verfahren. Die gleichzeitige Berücksichtigung verschiedener Detailgrade beim Formvergleich verbessert die Robustheit durch eine Reduktion lokaler Minima.

Unser Hauptaugenmerk lag auf der Flexibilität der Algorithmen einerseits bezüglich zu identifizierender Geometrien (Punkte, Linien oder auch Oberflächen, Abb. 2), und andererseits bezüglich der Diskretisierung von Currents und Wind. In bisherigen Ansätzen erfolgte die Wind-Diskretisierung mit radialen Basisfunktionen, die mit den Current-Basisfunktionen assoziiert sind und mit der Raumdeformation verschoben werden. Dadurch sind beide Diskretisierungen gekoppelt.

▶ Abb. 3:
Genauigkeit für verschiedene Winddiskretisierungen.



Die teilweise deutlichen Unterschiede in der lokalen Regularität von Formen und Wind legen jedoch eine separate Diskretisierung nahe. Der Wind wurde deshalb durch Finite Elemente diskretisiert. Die erforderliche Regularisierung des Windes erfolgt hier durch die Lösung einer elliptischen PDE anstelle der Gauß-Transformation bei radialen Basisfunktionen. Die stationären FE-Basisfunktionen vereinfachen die Evolutionsgleichungen wesentlich und gestatten damit einen direkten Transport auch von Currents für Linien, Flächen und Volumina, die erstmals einheitlich behandelt werden konnten³. Der lokale Träger der FE-Funktionen ist

dabei wesentlich für die Effizienz. Die Trennung von Current- und Winddiskretisierung erlaubt die Wahl unterschiedlicher Ansatzräume und eine unabhängige Verfeinerung des Windgitters. In ersten Versuchen konnte eine wesentliche Effizienzsteigerung durch adaptive Verfeinerung demonstriert werden (Abb. 3). Die Implementierung verwendet den NLP-Löser Ipopt zur Minimierung und greift auf die FE-Bibliothek libMesh zurück, welche C^1 -konforme Elemente anbietet.

Die Diskretisierung der Currents erfolgt adaptiv mittels eines Greedy-Algorithmus passend zur Spektralweite des Ähnlichkeitsmaßes an Positionen des maximalen Darstellungsfehlers. Die Verwendung einer einzigen Spektralweite führt in verschiedenen Situationen zu mehreren lokalen Minima. Daher wurde das Ähnlichkeitsmaß um die simultane Berücksichtigung einer Skala von Spektralweiten erweitert, was zu deutlich robusteren Verfahren führt. Der numerische Zusatzaufwand ist aufgrund der Linearität der adjungierten Gleichungen minimal⁴.

Die Möglichkeit zur simultanen Behandlung von Formen unterschiedlicher Dimension ist für die Korrespondenz korrelierter anatomischer Strukturen von Bedeutung. So konnte die gemeinsame Abbildung von Unterkieferknochen und -nerv demonstriert werden (Abb. 2). Die Berücksichtigung verschiedener Formdimensionen erlaubt ebenso wie die Verwendung mehrerer Spektralweiten eine robustere und genauere Korrespondenzberechnung insbesondere bei filigranen Strukturen.

Zur Veranschaulichung und Interpretation der Resultate wurde eine adäquate Visualisierung diskreter Currents (Abb. 2) entwickelt und in ZIBAmira integriert.

¹ S. C. Joshi, M. I. Miller: **Landmark Matching via Large Deformation Diffeomorphisms**. IEEE Transactions on Image Processing, 9(8): 1357–1370, 2000.

² S. Durrleman, X. Pennec, A. Trounev, N. Ayache: **Statistical models of sets of curves and surfaces based on currents**. Medical Image Analysis, 13(5): 793–808, 2009.

³ A. Günther, H. Lamecker, M. Weiser: **Direct LDDMM of Discrete Currents with Adaptive Finite Elements**. In Proc. 3rd MICCAI Workshop on Mathematical Foundations of Computational Anatomy, pp. 1–14, 2011. ⁴ A. Günther, H. Lamecker, M. Weiser: **Numerical LDDMM of m-currents with Finite Elements**. MATHEON Preprint #866, eingereicht beim Int. Journal of Computer Vision, 2012.

DER SATZ VON GAUSS IN DER MOLEKÜLKINETIK

KORRESPONDENZFINDUNG EINGEBETTETER FORMEN MITTELS FINITER ELEMENTE

Bearbeitet von: Konstantin Fackeldey, Marcus Weber, Alexander Bujotzek, Ole Schütt, Peter Deuffhard

Kooperationen: Freie Universität Berlin, Institut für Mathematik und Informatik; Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM);

Sfb-765 „Multivalenz als chemisches Organisations- und Wirkprinzip“

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A19

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/numerik/cmd/projekte/projektetails/article/matheon-a19.html, www.matheon.de

Verfahren	Aufwand	Problem
Langzeitsimulation	$O(1/(1-\lambda_2))$	$\lambda_2 \approx 1$, Metastabilitäten
Zerlegung des Konformationsraumes	$O(m/r)$	$r \ll 1$, geringer Überlapp zwischen den Teilmengen
Satz von Gauß	$O(m \cdot f)$, $f < m$	Übergangsbereiche

◀ Aufwandabschätzung der verschiedenen Simulationszugänge.

In den vergangenen Jahren wurde von der Hardware-Seite aus viel zur Beschleunigung von moleküldynamischen Simulationen unternommen. Jedoch auch ein speziell für Moleküldynamik gebauter Rechner, wie beispielsweise ANTON (USA), benötigt für ein Protein mit 23.000 Atomen etwa 270 Jahre, um eine Sekunde „real life“ zu simulieren¹. Vor bereits 14 Jahren wurde am ZIB der mathematische Grundstein gelegt, um von einer Beschreibung durch punktbasierte Trajektorien zu den mengenbasierten Aufenthalts- und Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen metastabilen Konformationen des Moleküls zu gelangen, woraus sich der heute weltweit intensiv erforschte Bereich der Konformationsdynamik entwickelte^{2,3}.

Zunächst ersetzte man den deterministischen Zugang, in dem ein schlecht-konditioniertes Anfangswertproblem gelöst werden soll, durch einen gemischt stochastisch-deterministischen Transferoperator, der auf Generierung gut-konditionierter Kurzzeittrajektorien basiert. Der Aufwand bei der Durchführung einer klassischen Langzeitsimulation mit diesem Verfahren bleibt jedoch wegen der selten zu beobachtenden, aber statistisch zu erfassenden Sprünge zwischen den metastabilen Konformationen extrem hoch. Abschätzen lässt sich dieser Aufwand durch den zweitgrößten Eigenwert (λ_2)

des Transferoperators, der sehr nahe bei 1 liegt (s. Tabelle, 1. Zeile). Nutzt man eine Zerlegung des Konformationsraums des Moleküls und die lokalisierte Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten, kommt das Problem der hohen Dimension der Konformationsräume ins Spiel. Die Struktur des oben erwähnten Proteins wird z.B. durch einen 69.000-dimensionalen Raum beschrieben, was sicherlich die Kapazitäten sämtlicher gitterbasierter Ansätze sprengt. Die am ZIB vor ungefähr 8 Jahren entwickelten gitterfreien Methoden haben dieses Problem handhabbar gemacht⁴. Bei einer Zerlegung des Raumes in m Basisfunktionen sinkt der Simulationsaufwand insgesamt. Es bleibt jedoch die schlechte Kondition des Problems, aus den Übergangswahrscheinlichkeiten (bzw. aus den inneren Produkten der Basisfunktionen) die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in den metastabilen Konformationen auszurechnen⁵. Hierzu müssten die um einen Faktor r dünner besiedelten Überlappbereiche der Basisfunktionen ausreichend oft besucht werden (s. Tabelle, 2. Zeile).

An einer Verbesserung dieser Statistik wurde am ZIB intensiv in den letzten Jahren gearbeitet. Zunächst wurde klar, dass das Problem, durch direkte Methoden die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Konformationsraum zu bestimmen, gutkonditioniert ist⁶. Vielversprechend



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Biologisch relevante Änderungen von Proteinstrukturen sind seltene Ereignisse im Vergleich zu dem schnellen, thermischen „Zittern“ dieser Moleküle. Simuliert man am Rechner die Zitterbewegungen eines einzelnen Proteins, muss man einen sehr langen Zeitraum warten, bis relevante Konformationsänderungen eintreten. Das führt zu einer schlechten Statistik, so als wolle man von der Beobachtung eines einzelnen Lotto-Spielers auf die Gewinnchancen beim Lotto schließen. Grundlegende mathematische Resultate zum effektiven Generieren statistischer Daten wurden im Projekt A19 im MATHEON entwickelt.

erscheint uns derzeit der Ansatz, thermodynamische Größen bei der Auswertung der Simulationen hinzuzuziehen. Anfangs beschränkten wir uns in einer Heuristik auf die Auswertung potenzieller Energien, um Enthalpien zu schätzen⁷. Später wurden dann auch entropische Eigenschaften (Verteilung der Datenpunkte) genutzt, als diese innerhalb einer SFB-Kooperation untersucht wurden⁸. Auf diese Weise lässt sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte im Konformationsraum durch das Generieren von m (Anzahl der Basisfunktionen) getrennten Simulationen lösen, ohne dabei ausreichende Informationen über den Überlapp der Basisfunktionen sammeln zu müssen. Auf diesem Stand haben wir im Berichtszeitraum ein frei verfügbares Softwarepaket ZIBMolPy erstellt, das mit dem weit verbreiteten Simulationspaket GROMACS gekoppelt werden kann⁹.

Im Berichtszeitraum wurde zudem gezeigt, dass aus den beschriebenen direkten Methoden auch auf die Übergänge zwischen den Konformationen geschlossen werden kann, ohne jemals einen kompletten Konformationsübergang moleküldynamisch simuliert zu haben¹. Es

stellte sich heraus, dass man hierzu zwar wiederum eine gute Statistik der Überlappbereiche zwischen den Basisfunktionen benötigt, diese aber unabhängig von den Basisfunktionen abgetastet werden können. Hat jede Basisfunktion im Schnitt f Nachbarn, so ist die Simulationaufgabe mit einem Aufwand $O(m \cdot f)$, $f < m$ lösbar.

Mathematische Grundlagen für diese Effizienzsteigerung bilden zwei wichtige Schritte. Zum einen beschreibt man die Prozesse in Form von Übergangsraten¹⁰ (Molekülkinetik), zum anderen macht man sich den Satz von Gauß zu Nutze bei der Galerkin-Diskretisierung des neu postulierten infinitesimalen Generators. Dieser besagt, dass instantane Wahrscheinlichkeitsflüsse zwischen Basisfunktionen nur durch die Überlappbereiche benachbarter Basisfunktionen möglich sind. Kurz gesagt erhält man die Information über die Kinetik nicht aus der zeitlichen Analyse einzelner Trajektorien, sondern über die genaue enthalpische und entropische Analyse von Übergangsregionen im Konformationsraum, die man zu diesem Zwecke ausreichend fein diskretisiert haben muss. Hierzu steht eine adaptive Strategie zur Verfügung.

Abschätzung der Rechenzeiten für die Simulation eines realistischen Protein-Ligand-Bindungsvorgangs (Zeitskala Millisekunden), bei 100 Simulationsschritten pro CPU-Sekunde und 300 Basisfunktionen. ▶

Verfahren	Rechenzeit	Bemerkung
Langzeitsimulation	320 CPU-Jahre	Selten beobachtbare Bindungsvorgänge
Zerlegung des Konformationsraumes	11 CPU-Monate	Typischer Wert $r=10^7$
Satz von Gauß	3 CPU-Tage	10.000 Simulationsschritte

¹ M. Weber: **A Subspace Approach to Molecular Markov State Models via a New Infinitesimal Generator**. Habilitationsschrift, FU Berlin, Mathematik und Informatik, 2011. ² P. Deuffhard: **From molecular dynamics to conformational dynamics in drug design**. In: M. Kirkilionis, S. Krömker, R. Rannacher, und F. Tomi (eds.), Trends in Nonlinear Analysis, 269–287, 2003. ³ P. Deuffhard, C. Schütte: **Molecular conformation dynamics and computational drug design**. In: J. M. Hill and R. Moore (eds.), Applied Mathematics Entering the 21st Century. Proceedings ICIAM 2003, 91–119, 2004. ⁴ M. Weber: **Meshless Methods in Conformation Dynamics**. Dissertationsschrift, FU Berlin, Mathematik und Informatik, 2006. Veröffentlicht im Verlag Dr. Hut, München. ⁵ S. Kube and M. Weber: **Computation of equilibrium densities in metastable dynamical systems by domain decomposition**. Numerical Analysis and Applied Mathematics, 1048: 339–342. Int. Conf. on Num. Anal. and Appl. Math., AIP Conference Proceedings, Kos, 2008. ⁶ M. Weber, S. Kube, L. Walter, P. Deuffhard: **Stable computation of propability densities for metastable dynamical systems**. SIAM J. Multisc. Mod., 6(2): 396–416, 2007.

⁷ A. Bujotzek, M. Weber: **Efficient Simulation of Ligand-Receptor Binding Processes Using the Conformation Dynamics Approach**. Journal of Bioinformatics and Computational Biology, 7(5): 811–831, 2009. ⁸ M. Weber, A. Bujotzek, K. Andrae, M. Weinhart, R. Haag: **Computational entropy estimation of linear polyether modified surfaces and correlation with protein resistant properties of such surfaces**. Molecular Simulation, 37(11): 899–906, 2011. ⁹ <https://github.com/CMD-at-ZIB/ZIBMolPy> ¹⁰ K. Fackeldey, S. Röblitz, O. Scharf, M. Weber: **Soft versus hard metastable conformations in molecular simulations**. Particle Methods II, Fundamentals and Applications, Barcelona, Spain 26–28 Oct. 2011, E. Onate und D. R. J. Owen (eds.), 899–909, 2011.

PRÄZISE NUMERISCHE SIMULATION DES NICHT-LOKALEN HYDRODYNAMISCHEN DRUDE-MODELLS MIT FEM

Bearbeitet von: Kirankumar Hiremath, Lin Zschiedrich, Frank Schmidt

Kooperationen: Felix Schlosser, Marten Richter, Andreas Knorr (TU Berlin) und JCMwave GmbH

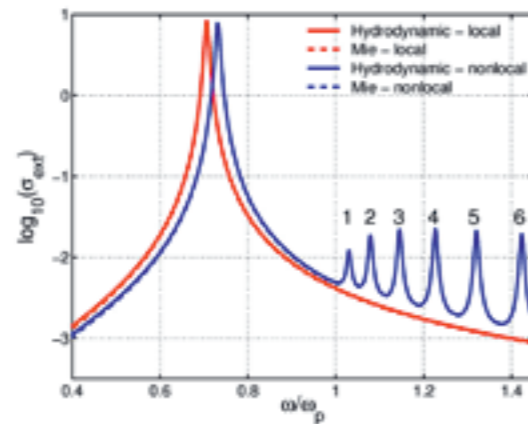
Förderung: SPP 1391 „Ultrafast Nanooptics“

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/nonlocal-hydrodynamic-drudemodel

Die Wechselwirkung von Licht mit Metallen ist ein faszinierender Teilbereich der Optik. Die „delokalisierten“ Elektronen im Metall interagieren auf einzigartige Weise mit dem Licht. Durch die Beleuchtung von metallischen Nano-Strukturen mit Licht bestimmter Wellenlängen werden durch gemeinsame Schwingungen der Elektronen stark lokalisierte elektromagnetische Felder, sogenannte Oberflächenplasmonen, erzeugt. Historische Glashersteller nutzten diesen Effekt aus, um Glas-Arbeiten mit einem erstaunlichen ästhetischen Reiz herzustellen. Der Lycugus-Becher aus dem 4. Jahrhundert nach Christus enthält zum Beispiel Nano-Kristalle aus Gold. Er erscheint beispielsweise in auffälligem Rot, wenn er von einer Lichtquelle außerhalb des Glases beleuchtet wird, erscheint aber grün, falls die Lichtquelle im Glas positioniert wird.

Das Arbeitsgebiet Nanoplasmonik birgt enormes Potenzial in neu entstehenden Gebieten wie der gemeinsamen Integration von Photonik und Elektronik, der Entwicklung von Biosensoren oder verbesserter Lichtausbeute in Solarzellen.

Die Wechselwirkungen zwischen Licht und Materie in plasmonischen Strukturen wird durch die Maxwellgleichungen beschrieben, wobei ein geeignetes Materialmodell für Metalle nötig ist. Eines der am weitesten verbreiteten Materialmodelle ist das Drude-Modell, bei dem die Dynamik der „delokalisierten“ Elektronen als gedämpfter harmonischer Oszillator beschrieben wird, der durch das einfallende elektromagnetische Feld angetrieben wird. In diesem klassischen Modell wird ein Elektron, das sich am Punkt r im Raum befindet, nur durch das einfallende Feld am Punkt r beeinflusst. Deshalb ist dieses Modell auch als „lokales Drude-Modell“ bekannt.



Lokale Drude-Modelle sind jedoch nur valide, falls die Strukturen größer sind als die mittlere freie Weglänge der Elektronen im Material. Diese mittlere freie Weglänge beträgt in Materialien wie Gold und Silber, die typischerweise für die Ausnutzung plasmonischer Effekte verwendet werden, etwa 40 bis 50 Nanometer. Bei kleineren plasmonischen Strukturen hingegen muss unter anderem auch die Streuung an der Oberfläche berücksichtigt werden, was zu einer angepassten dielektrischen Funktion führt. Diese besagt, dass ein Elektron, das sich am Punkt r befindet, nicht mehr nur durch das einfallende Feld an diesem Punkt beeinflusst wird, sondern auch durch das einfallende Feld in einer Umgebung dieses Punktes. Nicht-lokale Werkstoffantworten verändern die optischen Eigenschaften von nano-plasmonischen Bauteilen signifikant. Wie aus Abbildung 1 ersichtlich, wird die fundamentale oberflächenplasmonische Resonanz zu höheren Frequenzen verschoben und mehrere nicht-lokale Resonanzen erscheinen im Spektrum. Im Frequenzbereich wird das nicht-lokale Materialmodell durch ein System von gekoppelten Gleichungen für das elektrische Feld E und einen zusätzlichen Polarisationsstrom J_{HD} der Elektronenwolke

Abb. 1: Antwort eines Nano-Drahtes, einmal mit dem konventionellen lokalen (physikalisch falschen) und einmal mit dem verbesserten nicht-lokalen (physikalisch richtigen) Modell berechnet. Das verbesserte Modell zeigt eine Spektralverschiebung und zusätzliche Resonanzen, die auch experimentell zu beobachten sind.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Nano-plasmonische Bauteile bergen großes Potenzial für neuartige Anwendungen. Oft sind solche Strukturen nur wenige Nanometer groß, und für die präzise Modellierung und Simulation müssen fortgeschrittene Material-Modelle wie das nicht-lokale hydrodynamische Drude-Modell verwendet werden. Die rigorose Simulation des nicht-lokalen Drude-Modells basiert auf einer Variationsformulierung in $H(\text{curl})$ und $H(\text{div})$ und wurde mit dem Finite-Elemente-Paket JCMsuite umgesetzt. Im Gegensatz zu anderen Ansätzen erzeugt unser Ansatz keine unphysikalischen Lösungen und ist ein Beitrag zum weiteren Verständnis nano-plasmonischer Effekte.

Abb. 3: Lokalisierte oberflächenplasmonische Hauptresonanz für das verbesserte nicht-lokale Drude-Modell (physikalisch richtig).

beschrieben. Dieser Polarisationsstrom wird als ein hydrodynamischer Fluss modelliert:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mu_0^{-1} (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) \\ - \omega^2 \epsilon_0 \epsilon_{\text{loc}}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega \mathbf{J}_{HD}(\mathbf{r}, \omega) \\ \beta^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{J}_{HD}(\mathbf{r}, \omega)) \\ + \omega(\omega + i\gamma) \mathbf{J}_{HD}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega \omega_p^2 \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \end{aligned}$$

Dabei sind ω_p^2 die Plasmfrequenz des freien Elektronengases und γ die aus der Kollision der Elektronen resultierende Dämpfungskonstante. Der Term β ist proportional zur Fermi-Geschwindigkeit, wobei die Proportionalitätskonstante von verschiedenen Eigenschaften des physikalischen Systems abhängt. Die Permittivität und Permeabilität des Materials werden wie üblich mit ϵ_0 und μ_0 für die Kreisfrequenz mit ω bezeichnet. ϵ_{loc} ist die relative Permittivität des lokalen Drude-Modells.

Abb. 2: Lokalisierte oberflächenplasmonische Hauptresonanz für das konventionelle lokale Drude-Modell (physikalisch falsch). Vergleiche auch mit der physikalisch richtigen Hauptresonanz in Abbildung 3.

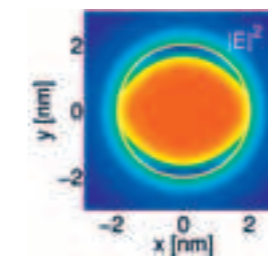
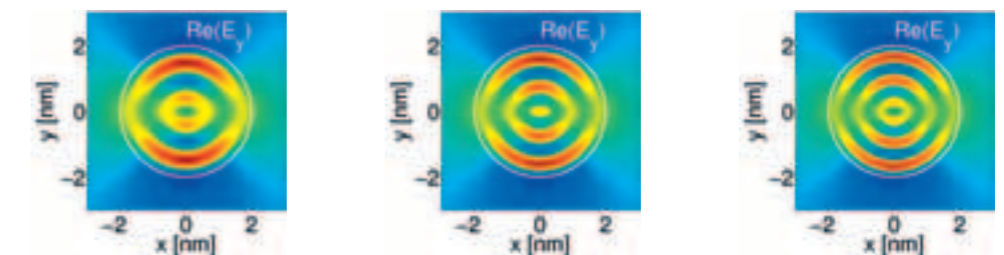


Abb. 4: Nicht-lokale Resonanzen dritter, vierter und fünfter Ordnung (physikalisch richtig).



In ersten Arbeiten zu dieser Problemstellung wurden Vereinfachungen, wie etwa zusätzliche Wirbelfreiheit der Stromdichte, angenommen, die physikalisch nicht richtig sind und dadurch zu unphysikalischen Lösungen führten^{1,2}. Dieses Problem umgehen wir in unserer jüngsten Arbeit³ mit Hilfe einer direkten Variationsformulierung in den Räumen $H(\text{curl})$ für das elektrische Feld bzw. $H(\text{div})$ für die Stromdichte. Unter Verwendung von Nédélec's Finite Element-Räumen erhält man daraus eine konsistente Diskretisierung, welche im Finite-Elemente-Paket JCMsuite umgesetzt wurde⁴. Die so simulierten Nano-Drähte stimmen sehr gut mit den analytischen Resultaten überein (siehe Abbildung 1). Im Gegensatz zu Methoden, die auf einer wirbelfreien Näherung basieren, treten hier keine unphysikalischen Lösungen auf, was für die Simulation von modernsten Metallo-Dielektrischen Nano-Strukturen von entscheidendem Vorteil ist.

¹ J. McMahon, S. Gray, and G. Schatz. **Calculating nonlocal optical properties of structures with arbitrary shape.** Physical Review B, 82(3):035423, 2010

² S. Raza, G. Toscano, A. Jauho, M. Wubs, and N. Mortensen. **Unusual resonances in nanoplasmonic structures due to nonlocal response.** Physical Review B, 84(12):121412, 2011. ³ K. Hiremath, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Numerical solution of nonlocal hydrodynamic drude model for arbitrary shaped nano-plasmonic structures using Nédélec finite elements.** Arxiv preprint arXiv:1201.1527v2 (submitted to J. Comp. Phys.), 2012. ⁴ J. Pomplun, S. Burger, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Adaptive finite element method for simulation of optical nano structures.** Phys. Stat. Sol. (b), 244:3419–3434, 2007

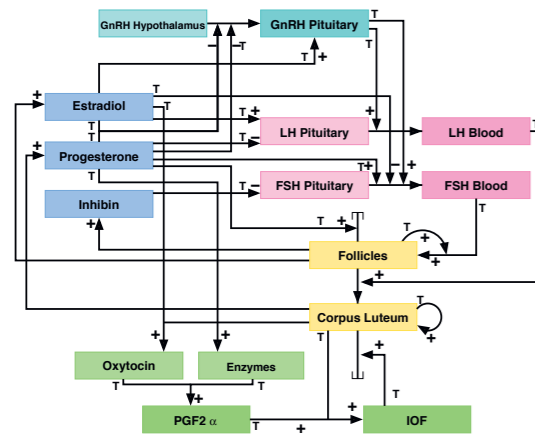
BOVCYCLE: MATHEMATISCHE MODELLIERUNG DES MILCHKUHZYKLUS

Bearbeitet von: Claudia Stötzel, Julia Plöntzke, Susanna Röblitz, Peter Deuffhard

Kooperation: M. Boer, H. Woelders, R. Veerkamp (Tierwissenschaften, U Wageningen, NL), M. Apri, J. Molenaar (Systembiologie, U Wageningen, NL), A. Bockmayr, H. Siebert, S. Jamshidi, H. Klarner (Diskrete Mathematik, FU Berlin), W. Heuwieser (Tierklinik für Fortpflanzung, Veterinärmedizin, FU Berlin), S. Shields, J. McNamara (Tierwissenschaften, Washington State University, USA)

Drittmittel: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A18

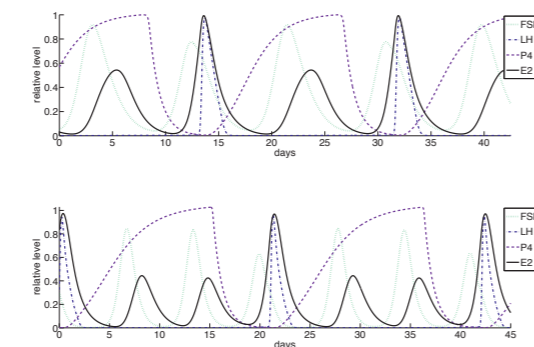
Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/bovcycle



Inspiziert durch das erfolgreiche Projekt zur Simulation des weiblichen Hormonzyklus beim Menschen (GynCycle¹) wurde in der AG Mathematische Systembiologie in Kooperation mit Tierwissenschaften ein Modell für den Hormonzyklus der Milchkuh entwickelt (BovCycle). Anstoß für dieses Projekt gab die Tatsache, dass seit den fünfziger Jahren eine gesteigerte Milchleistung mit erheblich gesunkenen Fruchtbarkeitsraten einhergeht. Die Ursachen hierfür sind unklar; sie könnten sowohl in vergangener Züchtungspolitik, Ernährungseinstellungen, verändertem Wohlbefinden oder anderen Umweltbedingungen zu suchen sein. Mathematische Modellierung kann dazu beitragen, die zugrunde liegenden Faktoren zu identifizieren und zu beeinflussen.

Um ein komplexes biologisches System wie den Estrus der Kuh mathematisch zu beschreiben und alle wichtigen Abhängigkeiten und Feedback-Mechanismen abzubilden, muss zunächst ein hohes Abstraktionslevel festgelegt werden. Hierzu betrachten wir mehrere miteinander verbundene physiologische Kompartimente: Den Hypothalamus, die Hypophyse, die Ovarien, den Uterus und das Blut. Diese enthal-

ten jeweils mehrere Komponenten (Hormone, Enzyme), die sich gegenseitig stimulieren oder inhibieren, ineinander transformieren, ausgeschüttet werden oder sich auflösen. In Abbildung 1 sind sämtliche modellierte Komponenten und Abhängigkeiten zusammengefasst.



Das beschriebene Zusammenspiel der Komponenten beschreiben wir mathematisch mit gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODEs), wobei die zumeist regulatorischen Mechanismen mit Hilfe von Hill-Funktionen, also sigmoidalen, schwellwertabhängigen, kontinuierlichen Funktionen, modelliert werden. Das in sich geschlossene System kommt ohne Stimuli aus und generiert aus sich selbst heraus periodische Lösungen. Es besteht aus 15 ODEs und 60 unbekanntem Parametern. Für die Lösung der ODEs wird der am ZIB entwickelte Löser LIMEX (Linear implizites Euler-Verfahren mit Extrapolation) benutzt, Parameteridentifizierung an Daten aus der Literatur wurde mit affin invarianten Gauss-Newton Methoden² durchgeführt. Das Modell wurde zudem in SBML (Systems Biology Markup Language) implementiert. Dies ermöglicht die Arbeit mit dem Modell in verschiedenen Softwarepaketen (z. B. CellDesigner, BioPARKIN³) und unterstützt den wissenschaftlichen Austausch mit anderen For-

◀ Abb. 1:
Mechanismen in BovCycle.

◀ Abb. 2:
Unterschiedliche Parametrisierungen führen zu unterschiedlichen follikularen Wellenmustern.

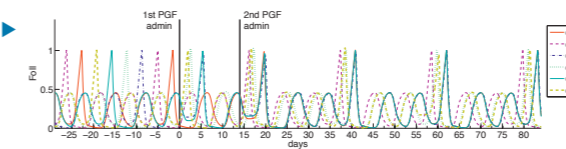
Ziel: Modellierung und mathematische Untersuchung der Dynamik des Hormonzyklus der Milchkuh



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Seit vielen Jahren ist bekannt, dass Milchkuhe zwar immer mehr Milch produzieren, gleichzeitig aber ihre Fruchtbarkeitsrate sinkt. Dies erfordert ein Umdenken in der landwirtschaftlichen Tierhaltung, nicht nur aus ökonomischer Sicht, sondern auch aus Gründen der Tiergesundheit. Systembiologische Ansätze können dazu beitragen, die zugrunde liegenden Abhängigkeiten zwischen genetischer Disposition, Fütterung, Herdenmanagement und Fertilisation besser zu verstehen.

schern auf dem Gebiet der Systembiologie. Im Rahmen des MATHEON untersuchen wir außerdem den Milchkuhzyklus mit hybrider (kontinuierlich-diskreter) Modellierung. Diskretisieren des Zustandsraums und Ausschalten der impliziten Zeitabhängigkeit führt zu einem abstrakteren Modell des Kuhzyklus, welches wir mit Werkzeugen aus der diskreten Mathematik untersuchen. Insbesondere bei schlechter experimenteller Datenlage (wenig gemessene Stoffe, keine bekannten Ratenkonstanten oder Schwellwerte) können ausgereifte diskrete Analysetools Aufschlüsse über den Parameterraum und die Dynamik des Zustandsraumes geben.

Abb. 3: Die Synchronisation des Estrus verschiedener Kühe erfordert einen bestimmten Zeitabstand zwischen zwei Dosierungen des Hormons PGF2α.



Der Estruszyklus einer Kuh hat eine durchschnittliche Länge von 21 Tagen und beinhaltet im Gegensatz zum menschlichen Zyklus mehrere follikuläre Wellen, zumeist zwei oder drei, wobei es nur in der letzten Welle zum Eisprung kommt. Dreiwellige Zyklen werden höherer Fruchtbarkeit zugeordnet.

Der Grund für einen zwei- oder dreiwelligen Verlauf ist biologisch nicht nachgewiesen, doch mathematische Untersuchungen mit BovCycle untermauern plausible biologische Vermutungen⁴. Mit unterschiedlichen Parametrisierungen von BovCycle lassen sich unterschiedliche Wellenverhalten erzeugen (vergleiche Abbildung 2) und so im mathematischen Modell Pfade identifizieren, die für die Anzahl der Wellen pro Zyklus verantwortlich sind. Modellsimulationen erlauben den Rückschluss auf mögliche Kandidaten, auf die die experimentellen Bemühungen fokussiert werden können.

Ein Vorteil der mathematischen Modellierung eines biologischen Systems ist die einfache Durchführung externer Manipulationen wie z. B. Medikamentengaben. Solche sogenannten in-silico Experimente sind ein vielversprechendes Instrument zur zukünftigen Versuchsplanung. Das Modell BovCycle ist in der Lage, die Ergebnisse aus Synchronisationsstudien nachzubilden⁵. Solche Studien werden beispielsweise durchgeführt, um Besamungen besser zu steuern oder Studien an mehreren Tieren zu erleichtern. Abbildung 3 zeigt die Ergebnisse der Validierung des Modells anhand von Ergebnissen aus Synchronisationsprotokollen. Um die Zyklen einer großen Anzahl von Kühen zu synchronisieren, spritzt man ihnen mehrfach Prostaglandin F2α. Dieses Hormon löst in bestimmten Zyklusstadien den Zerfall des Gelbkörpers aus und bewirkt in bestimmter Anwendungsvorschrift einen „Neustart“ des Zyklus.

Obwohl es bereits einige wenige mathematische Modelle im Bereich der Tierwissenschaften gibt, steckt die Systembiologie auf diesem Gebiet noch in den Kinderschuhen. Immer größere Datenmengen erfordern jedoch für die Zukunft den zunehmenden Einsatz von mathematischen Modellen. Um beispielsweise die Beziehungen zwischen Stoffwechsel und Reproduktion zu analysieren, integrieren wir gegenwärtig ein existierendes Stoffwechselmodell⁶ in BovCycle. Auf der einen Seite wollen wir zu einem besseren Verständnis komplexer biologischer Mechanismen beitragen, auf der anderen Seite wollen wir die Vorhersagekraft mathematischer Modelle für die Simulation von externen Einflüssen nutzen. Zudem kann ein mathematisches Modell in der Zukunft Versuchsplanungen unterstützen und im Idealfall zur Reduktion von Tierversuchen beitragen.

¹ S. Röblitz, C. Stötzel, P. Deuffhard, H. M. Jones, D.-O. Azulay, P. van der Graaf, S. W. Martin: **A mathematical model of the human menstrual cycle for the administration of GnRH analogues**, ZIB-report 11–16. ² P. Deuffhard: **Newton Methods for Nonlinear Problems**, Springer, 2004. ³ T. Dierkes, M. Wade, U. Nowak, S. Röblitz: **BioPARKIN: Biology-related Parameter Identification in Large Kinetic Networks**, ZIB-report 11–15, <http://www.zib.de/de/numerik/csbi/software/bioparkin.html>

⁴ H. M. T. Boer, S. Röblitz, C. Stötzel, R. F. Veerkamp, B. Kemp, H. Woelders: **Mechanisms regulating follicle wave patterns in the bovine estrous cycle investigated with a mathematical model**, Journal of Dairy Science 2011, 94(12), pp. 5987–6000 ⁵ C. Stötzel, J. Plöntzke, S. Röblitz: **Advances in modelling of the bovine estrous cycle: Administration of PGF2alpha**, ZIB-report 11–17. ⁶ Model Molly, <http://www.vmtc.ucdavis.edu/metabolic/>

PROJEKTE DER ABTEILUNG NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: www.zib.de/Numerik/projects

MULTIVALENZ ALS WIRKPRINZIP

Bearbeitet von: A. Bujotzek, O. Scharkoi, A. Sedighi, M. Weber

Kooperation: FU/HU/TU Chemie, Charité

Förderung: Sfb-765, DFG

Inhalt: Mit Hilfe der Simulation multivalenter Bindungsprozesse tragen wir zur Analyse enthalpischer und entropischer Eigenschaften von Ligand-Rezeptor-Systemen und zum molekularen Design hochaffiner Wirkstoffe bei.

TRANSFORMATIONSPRODUKTE IM TRINKWASSER

Bearbeitet von: V. Durmaz, M. Weber

Kooperation: T. Ternes (BFG), H. Mückter (LMU München)

Förderung: BMBF, Verbundprojekt TransRisk

Inhalt: Wir entwickeln ein neues Verfahren zur Risikocharakterisierung von bisher nicht untersuchten aber vorhandenen Transformationsprodukten von Spurenstoffen im Trinkwasser. Hiermit sollen verschiedene Trinkwasseraufbereitungsmethoden vergleichend bewertet werden.

SELEKTIVES SCHMERZMITTEL

Bearbeitet von: O. Scharkoi, M. Weber, P. Deuffhard

Kooperation: Ch. Stein (Charité), Ch. Zöllner (Uniklinik Hamburg)

Inhalt: Das von uns entwickelte mathematische Verfahren und der von uns entwickelte Wirkstoff, der in der Lage ist, Entzündungsschmerzen durch selektive Adressierung von peripheren Opioid-Rezeptoren zu unterdrücken, wurden zum Patent angemeldet.

KONFORMATIONS-DYNAMIK FÜR PROTEINFALTUNG

Bearbeitet von: M. Klimm, K. Fackeldey, M. Weber

Kooperation: M. Scheffler (FHI)

Förderung: MPG-FHI

Inhalt: In diesem Projekt ist es das Ziel, ein effizientes Verfahren zu entwickeln, mit dem Proteinfaltungsprozesse am Rechner simuliert werden können. Die daraus resultierende Coarse Graining Strategie soll dann als eine Brücke zwischen der Quantenmechanik und der klassischen Moleküldynamik dienen.

KOPPLUNG VON DISKRETEN MIT KONTINUIERLICHEN MODELLEN

Bearbeitet von: K. Fackeldey

Kooperation: R. Krause, D. Krause (USI Lugano, Schweiz)

Inhalt: In diesem Projekt werden lokale atomare Simulationen mit makroskopischen kontinuumsmechanischen Formulierungen gekoppelt. Das Zusammenführen der beiden Skalen erfolgt über Lagrange-Multiplikatoren in der Handshakeregion, in der sich die atomare und die kontinuierliche Darstellung überlappen.

MODELLIERUNG UND SIMULATION DES WEIBLICHEN HORMONZYKLUS

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

Kooperation: Pharmazeutische Industrie

Förderung: Pharmazeutische Industrie

Inhalt: In diesem Projekt wurde ein Differentialgleichungsmodell entwickelt, mit dem die Gabe von Analoga des Hormons GnRH (Gonadotropin-freisetzendes Hormon) simuliert werden kann. Mit Hilfe der Modellsimulationen wird untersucht, welchen Einfluss Dosis und Dosis-Zeitpunkt (Zyklustag) auf den zukünftigen Verlauf des Zyklus haben.

HORMONZYKLUS DER MILCHKUHE

Bearbeitet von: C. Stötzel, S. Röblitz, J. Plöntzke

Kooperationen: M. Boer, H. Woelders (U Wageningen), W. Heuwieser (FU)

Inhalt: In Kooperation mit Tierwissenschaftlern werden anhand des am ZIB entwickelten Modells BovCycle Mechanismen untersucht, die die Fertilität von Milchkühen beeinflussen. Besonderes Augenmerk lag bisher auf der Analyse von Synchronisationsprotokollen sowie auf der Beeinflussung der folliculären Wellenmuster.

EFFIZIENTE ALGORITHMEN IN DER SYSTEMBIOLOGIE

Bearbeitet von: T. Dierkes, M. Wade, S. Röblitz, P. Deuffhard

Inhalt: Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung der ZIB-eigenen Software BioPARKIN (Biology-related PARAMeter identification in large KINetic networks) zur Modellierung, Parameteridentifizierung und Simulation biologischer Systeme. BioPARKIN verbindet effiziente numerische Algorithmen (LIMEX, NLSCON) mit einer graphischen Benutzeroberfläche zur Verwaltung von Daten und Modellen.

GITTERFREIE METHODEN FÜR DIE CHEMISCHE MASTERGLEICHUNG

Bearbeitet von: S. Röblitz, P. Deuffhard

Förderung: MATHEON, Projekt A18

Inhalt: Die chemische Mastergleichung beschreibt Reaktionssysteme, bei denen stochastische Einflüsse berücksichtigt werden müssen. Es handelt es sich um diskrete partielle Differentialgleichungen. Ziel ist die Erweiterung des diskreten Galerkin-Verfahrens auf gitterfreie Ansatzfunktionen für hochdimensionale Probleme.

DEFEKTRERKONSTRUKTION IN DER THERMOGRAPHIE

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

Kooperation: C. Maierhofer (BAM)

Förderung: BAM

Inhalt: Thermographie wird zur Erkennung von Fehlstellen verwendet. Wir entwickeln neuartige numerische Methoden zur schnellen Bestimmung von Tiefe und Form von Fehlstellen.

ATLASBASIERTE SEGMENTIERUNG

Bearbeitet von: A. Günther, M. Weiser, H. Lamecker, H.-C. Hege

Kooperation: X. Pennec (INRIA)

Förderung: MATHEON, Projekt F2

Inhalt: Für statistische Formatlanten ist die Herstellung einer Korrespondenz verschiedener Formen erforderlich. Dafür werden adaptive numerische Optimierungsverfahren auf Basis der LDDMM-Methoden entwickelt.

CHIRURGIEPLANUNG

Bearbeitet von: C. Klapproth, A. Schiela, L. Lubkoll, M. Weiser, P. Deuffhard, S. Zachow

Kooperation: R. Kornhuber (FU Berlin)

Förderung: MATHEON, Projekt A17

Inhalt: Die computergestützte Planung orthopädischer Operationen erfordert die Simulation der Biomechanik. Für dynamische Kontaktprobleme im Kniegelenk wurde eine adaptive Steuerung des kontaktstabilisierten Newmark-Verfahrens entwickelt. Zudem wurden Verfahren zur Formoptimierung von Knochenimplantaten analysiert und umgesetzt.

TRAJEKTORIENKOMPRESSION

Bearbeitet von: S. Götschel, M. Weiser

Kooperation: K. Polthier (FU Berlin)

Förderung: MATHEON, Projekt F9

Inhalt: Die adjungierte Berechnung von Gradienten für zeitabhängige Optimierungsprobleme erfordert die Speicherung großer Zustandstrajektorien. Wir entwickeln verlustbehaftete Kompressionsverfahren auf Basis hierarchischer Interpolation in adaptiven FE-Gittern.

ZEREBRALE ZIRKULATION

Bearbeitet von: M. Weiser, S. Zachow

Kooperation: D. Frey (Charité)

Förderung: Charité

Inhalt: Wir entwickeln quantitative Methoden zur Vorhersage der Durchblutung verschiedener Hirnregionen zur Entscheidungsunterstützung bei der Planung neurochirurgischer Eingriffe.

MEHRKÖRPER-ALGORITHMEN FÜR DAS MUSKULOSKELETALE SYSTEM

Bearbeitet von: R. Ehrig

Kooperation: G. Duda (Charité)

Förderung: SFB 760, Projekt C5, Vicon Motion Systems, Oxford

Inhalt: Die Methoden zur Rekonstruktion der skelettalen Kinematik aus optischen oder fluoroskopischen Daten wurden u. a. zur Entwicklung von diagnostischen Verfahren der Kniegelenksstabilität nach ACL-Ruptur und der Früherkennung von Osteoarthritis verwendet.

ELEKTRISCHE HERZERREGUNG

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

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

Inhalt: Die Simulation der Herzerregung ist aufgrund stark unterschiedlicher Zeit- und Ortsskalen schwierig. Wir entwickeln strukturausnutzende Verfahren zur Reduktion des Rechenaufwands bei gleichzeitiger Kontrolle des Diskretisierungsfehlers.

DEMO14

Bearbeitet von: M. Hammerschmidt, D. Lockau, F. Schmidt

Kooperation: Masdar PV GmbH, PVcomB, Forschungszentrum Jülich

Inhalt: Ziel ist die Entwicklung und Demonstration einer Silizium-Dünnschicht-Solarzelle mit 14% Zellwirkungsgrad. Unsere Aufgabe darin sind Simulation und Entwicklung von Oberflächentexturierungen und plasmonischen Strukturen, sowie Optimierung bestehender Designs. Es wurden erste Strukturoptimierungen durchgeführt.

MULTI-DIMENSIONALE MODELLIERUNG UND SIMULATION VON VCSELN

Bearbeitet von: M. Rozova, F. Schmidt

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

Förderung: SFB 787, Projekt B4

Inhalt: Es wurde ein mikroskopisches Mehr-Teilchen-Modell für 3D VCSEL-Strukturen entwickelt, und seine opto-elektronischen Eigenschaften analysiert. Die Generierung von gemischten Gittern für anisotrope VCSEL und die adaptive Steuerung der FE-Ordnung stellen einen wichtigen Aspekt für die zukünftige Forschung dar.

OPTIMIERUNG VON NANOSTRUKTURIERTEN DÜNNSCHICHT-SOLARZELLEN

Bearbeitet von: M. Blome, F. Schmidt

Kooperation: K. McPeak (OMEL ETH Zürich), J. Gansel (CFN Karlsruhe), M. Teillaud (INRIA Sophia Antipolis, France)

Förderung: MATHEON, Projekt D23

Inhalt: Im Rahmen eines interdisziplinären Projektes mit der ETH Zürich wurde die Effektivität nanostrukturierter Dünnschicht-Solarzellen systematisch optimiert. Zur geometrisch exakten Modellierung der untersuchten Solarzellen wurden Computer-Aided Design Software-Tools entwickelt, die es erlauben, parametrisierte Geometriemodelle zu erstellen und automatisch zu diskretisieren.

ELIMINATION UNPHYSIKALISCHER LÖSUNGEN IM RESONANZSPEKTRUM

Bearbeitet von: B. Kettner, F. Schmidt

Kooperation: A. Schädle (U Düsseldorf)

Förderung: MATHEON, Projekt D23

Inhalt: Bei der numerischen Untersuchung von Nano-Resonatoren entstehen unphysikalische Lösungen. Wir haben einen Algorithmus entwickelt, der aufgrund der verwendeten mathematischen Modelle in der Lage ist, die unphysikalischen Lösungen im Resonanzspektrum zu erkennen.

RANDBEDINGUNGEN FÜR PERIODISCHE AUSSEN-RÄUME

Bearbeitet von: T. Pollok, F. Schmidt

Kooperation: K. Schmidt (TU Berlin)

Förderung: MATHEON, Projekt D23

Inhalt: Wir haben für Streuprobleme mit periodischen Außenräumen eine neue Methode für die Berechnung geeigneter Randbedingungen entwickelt. Diese ist im Vergleich zu anderen Methoden dimensionsunabhängig und sehr viel allgemeiner.

NEUE KONZEPTE FÜR ABSORPTIONSMANAGEMENT IN SILIZIUM-DÜNNSCHICHT-SOLARZELLEN

Bearbeitet von: D. Lockau, F. Schmidt

Kooperation: Helmholtz-Zentrum Berlin

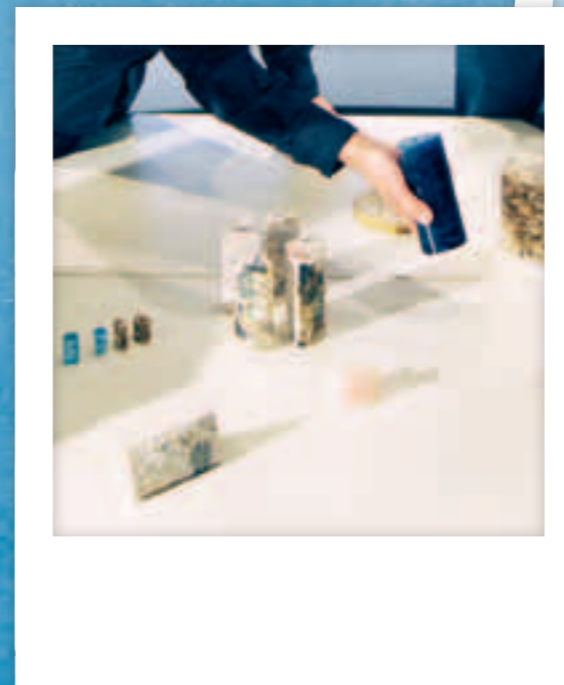
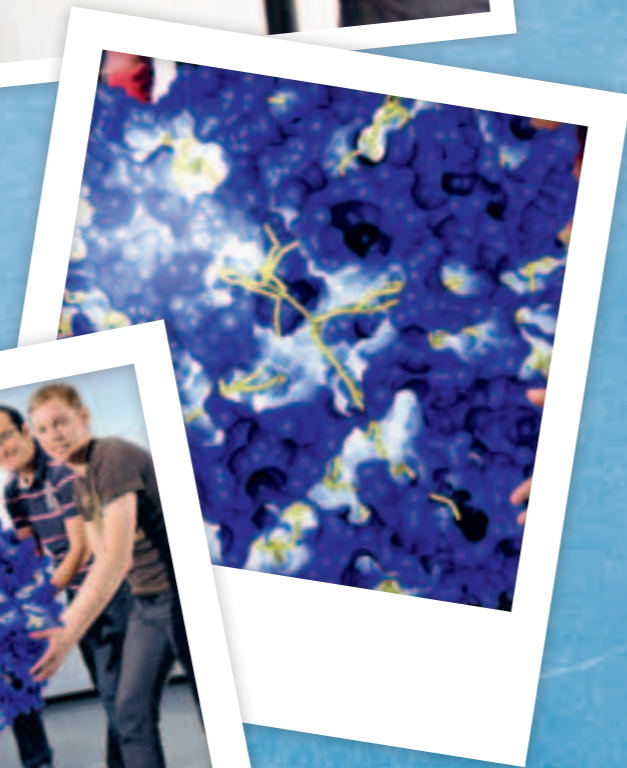
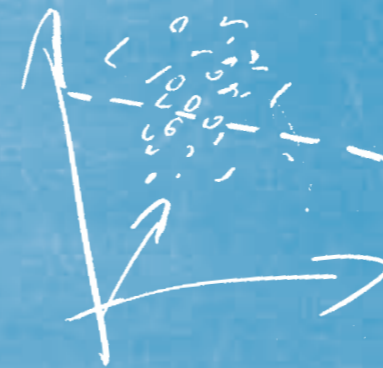
Inhalt: Im Kooperationsprojekt zur Simulation von polykristallinen Silizium-Dünnschicht-Solarzellen mit dem HZB wurde eine Optimierung von geeigneten periodischen Lichtfallenstrukturen durchgeführt. Dabei wurde gezeigt, dass die hergestellte Struktur eine größere Absorptionsverstärkung realisiert, als durch das Limit von Yablono-vitch gegeben.



VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE



$$s(b) = \bar{b} + \sum_{i=1}^n b_i p_i$$



VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

Leitung: Hans-Christian Hege

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/visual.html

MISSION

Bei der Analyse von Daten spielt die Visualisierung eine wichtige Rolle; sie hilft Fragen zu beantworten wie etwa: Welche interessanten Informationen sind in den Daten verborgen? Wie lassen sich diese Informationen algorithmisch finden? Wie lässt sich Information grafisch darstellen, so dass der Mensch das Wesentliche schnell erkennt? Wie lassen sich menschliche Kognition und maschinelle Analyse geschickt kombinieren? Auf diese Fragen versucht die Abteilung Visualisierung und Datenanalyse Antworten zu geben. Ein weiterer Schwerpunkt sind Methoden zur Extraktion von Strukturen aus räumlichen oder raumzeitlichen Daten, etwa von anatomischen Strukturen aus medizinischen Bilddaten oder von Wirbelstrukturen aus Strömungsdaten.

Zum Einsatz kommen Methoden der Bild-, Geometrie- und Datenanalyse, der Bild- und Geometrie-Verarbeitung, der Computergrafik und der Mensch-Computer-Interaktion. Ziel unserer methodischen und algorithmischen Entwicklungen sind praxistaugliche Lösungen. Fast alle Forschungsprojekte sind daher in einen konkreten Anwendungskontext eingebettet.

STRUKTUR

Die Abteilung gliedert sich derzeit in vier Arbeitsgruppen:

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

SPIN-OFFS

Aus der Abteilung sind bisher fünf Spin-Offs hervorgegangen; die jüngste (1000shapes GmbH) wurde im Jahr 2010 gegründet.

PREISE UND AUSZEICHNUNGEN

Norbert Lindow, Daniel Baum und Hans-Christian Hege erhielten für ihre Arbeit „Voronoi-Based Extraction and Visualization of Molecular Paths“ einen „Honorable Mention Award“ der IEEE Visualization 2011 in Providence, RI, USA.

VISUALISIERUNGSSYSTEME

Ziel der Arbeitsgruppe ist es, innovative Verfahren zur visuellen Datenanalyse zu entwickeln. Die Verfahren zur Visualisierung von Strukturen in unscharfen Daten wurden für vektorielle Felder weiterentwickelt – mit Anwendungen in der Klima- und Strömungsforschung. Das Programm zur Analyse von instationären Strömungen auf Basis Lagrangescher Merkmale wurde erfolgreich fortgesetzt (Koop. Noack, Pprime²). In der Molekülvisualisierung wurden Verfahren zur Berechnung/Visualisierung der Wege kleiner Moleküle in großen molekularen Strukturen entwickelt sowie Methoden zur interaktiven Darstellung von biologischen Strukturen in atomarer Auflösung (Koop. Weber, ZIB³). Im Projekt Cortex In Silico wurden Verfahren zur Analyse großer neuronaler Netzwerke Konnektivität geschaffen (Koop. Sakmann, MPI Florida⁴). Im Bereich der Medizin wurde ein Forschungsprojekt (Vigor++⁵) begonnen, in dem die Diagnose von Morbus Crohn verbessert werden soll. Ein DFG-gefördertes Projekt zur Einschätzung des Rupturrisikos von zerebralen Aneurysmen (Koop. Goubergrits, Kertzsch, Affeld; Charité⁶) ergaben sich klinisch interessante Resultate. Für die Mensch-Computer-Interaktion wurde ein Verfahren entwickelt, das perzeptuell nicht-lineare Steuerparameter in perzeptuell lineare abbildet.

VISUALISIERUNGSSYSTEME

Visualisierungsverfahren werden in die Softwaresysteme **Amira** (Koop. VI⁸) und **Avizo** (Koop. VSG⁹) integriert. Kooperationspartner des ZIB erhalten diese kostenfrei¹⁰. Die Verfahren zur Analyse des Porenraums in CT-Aufnahmen von Bodenproben und in Asphalt, zur Analyse von Rissen in CT-Aufnahmen von Beton und zur Analyse von Bodenradar- und Ultraschallmessungen von Betonbauteilen (Koop. BAM¹¹) wurden weiterentwickelt. Weiterhin wurden Verfahren zur Rekonstruktion von kompletten Mikrotubuli-Spindeln aus mehreren Elektronentomogrammen (Koop. Hyman, MPI CBG¹²) und zur Integration von Daten aus 2D- und 3D-Bildgebungsverfahren zur Untersuchung des Heilungsprozesses in Knochengewebe (Koop. Fratzl, MPI KG¹³) entwickelt. Die Rendering-Geschwindigkeit des Visualisierungssystem **Biosphere3d**¹⁴ zur interaktiven Darstellung von Landschaften wurde weiter verbessert. Im Rahmen des Berliner Skulpturennetzwerks wurde eine interaktive Plattform für die Vermittlung von Zusatzinformationen in Ausstellungen entwickelt, die in der aktuellen Pergamon-Sonderausstellung eingesetzt wird.

VERGLEICHENDE VISUALISIERUNG

Ziel der Arbeitsgruppe ist die Visualisierung von tensor- und vektorwertigen Daten. Methodische Schwerpunkte sind topologiebasierte Verfahren, Texturerzeugung sowie Mustererkennung. In der Tensorfeldvisualisierung steht die Entwicklung interaktiver Explorationsmethoden im Vordergrund. Sie ermöglichen das „Finden“ von charakteristischen Merkmalen, die in den Anwendungsgebieten häufig noch unbekannt sind. Spezifische Merkmalsräume ermöglichen Anwendern, ihnen vertraute Aspekte mit neuen Darstellungen zu verbinden.

Unterstützt wird die Datenanalyse durch Textur- und Glyphendarstellungen in ausgewählten Bereichen. Die Arbeiten zur Strömungsvisualisierung konzentrieren sich auf die Extraktion und Verfolgung langlebiger, kohärenter Strukturen. Eine Beschreibung als Extremalstrukturen in abgeleiteten Skalarfeldern ermöglicht den Einsatz von topologischen Extraktionsverfahren. Ihre besondere Stärke liegt in der Robustheit bezüglich Rauschen sowie einer natürlichen Hierarchisierung der Merkmale.

MEDIZINISCHE PLANUNG

Ziel der Arbeitsgruppe ist es, klinische Anwendungsfelder zu erschließen, in denen Methoden der modellgestützten Planung zu einer Verbesserung von Therapieergebnissen führen. Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe liegt auf der geometrischen 3D-Rekonstruktion komplexer Strukturen aus digitalen Messdaten, u.a. auf Basis von Formwissen. Zu diesem Zweck wird an robusten Formanpassungs- und Segmentierungsverfahren geforscht und es werden Formdatenbanken erstellt¹⁷. Einen weiteren Schwerpunkt stellen Verfahren zur automatischen Generierung von FE-Vernetzungen für komplexe geometrische Konstellationen dar. Unterschiedliche Verfahren werden dazu untersucht, implementiert und z.T. auch in **CGAL**¹⁸ integriert. Anwendung finden sie u.a. in der biomechanischen Simulation von mechanischen Beanspruchungen bei unterschiedlichen Prothesenkonfigurationen. Die Planung von chirurgischen Operationen im Kopfbereich ist weiterhin ein zentrales Forschungsthema¹⁹. Mit wachsender Größe der Formdatenbanken und verbesserter prädiktiver Qualität der statistischen Formmodelle werden diese zunehmend als individuelle Referenzen in der chirurgischen Planung verwendet.

¹ www.zib.de/de/visual/algorithms.html ² Institute P, Poitiers, Frankreich www.pprime.fr ³ AG Mathematischer Molekülewurf, www.zib.de/de/numerik/cmd.html

⁴ Max Planck Florida Institute, www.maxplanckflorida.org ⁵ Virtual gastrointestinal tract, www.vigorppp.eu

⁶ Labor für Biofluidmechanik, www.charite.de/biofluidmechanik

⁷ www.zib.de/de/visual/visualisierungssysteme.html ⁸ Visage Imaging, www.amira.com ⁹ Visualization Sciences Group, www.vsg3d.com

¹⁰ <http://amira.zib.de> ¹¹ BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, www.bam.de ¹² Max-Planck-Institut für Molekulare Zellbiologie und Genetik, www.mpi-cbg.de ¹³ Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, www.mpikg.mpg.de ¹⁴ **Biosphere3d** ¹⁵ www.zib.de/de/visual/vergleichende-visualisierung.html ¹⁶ www.zib.de/de/visual/medizinische-planung.html ¹⁷ Förderung u. a.: EU FP7 – MXL, www.m-x-l.eu, MATHEON F2, University of Calgary (CA)

¹⁸ Computational Geometry Algorithms Bibliothek, www.cgal.org, <http://geometryfactory.com/portfolio/tetrahedral-mesh-generation-for-therapy-planning>

¹⁹ Koop.: Universitätsklinik Köln; Klinik Prof. Sailer AG in Zürich, CH

WEGE IN MOLEKÜLEN UND MULTISKALEN – VISUALISIERUNG BIOLOGISCHER STRUKTUREN

Bearbeitet von: Norbert Lindow, Daniel Baum, Hans-Christian Hege

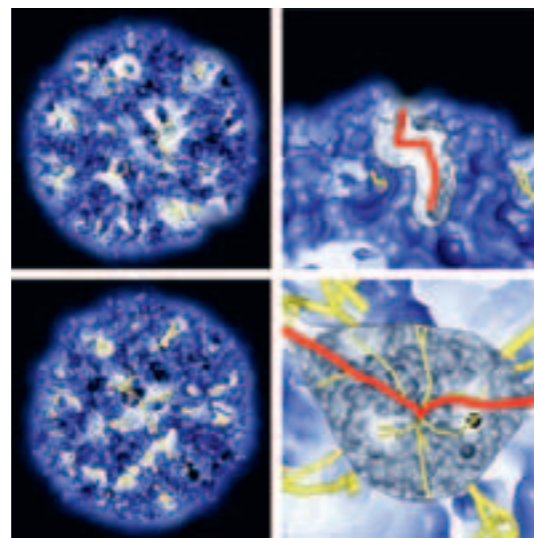
Förderung: Freie Universität Berlin (Theoretische Molekulare Biophysik, AG Bondar), Zuse Institut Berlin (Mathematischer Moleküldentwurf, AG Weber)

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/molvis.html

Die komplexen Abläufe in biologischen Systemen, wie Organellen, Zellen, Organen oder gar kompletten Organismen, versucht man einerseits systembiologisch zu erfassen, um die zahlreichen Teilprozesse in einen Gesamtzusammenhang zu bringen, und andererseits biochemisch, um die zugrundeliegenden molekularen Wechselwirkungen zu verstehen. Im vorliegenden Projekt geht es um die molekularen Details der Wechselwirkungen, die oft den Schlüssel zur Beantwortung offener Fragen in der Biochemie, Molekularbiologie und Pharmakologie liefern. Die Interaktionen laufen zwischen Partnern sehr unterschiedlicher Größe ab: zwischen kleinen und größeren Molekülen, Makromolekülen und Verbänden von Makromolekülen, die subzelluläre biologische Strukturen bilden. Sie können mit numerischen Simulationen untersucht werden. Jedoch können diese sehr aufwendig sein oder gar am Rande des Rechenbaren liegen, etwa wenn herausgefunden werden soll, an welchen Stellen eines Proteins ein Molekül binden kann, oder wie es an die Bindungsstellen gelangen kann. Eine schnelle Berechnung der möglichen Wege kleiner Moleküle innerhalb großer Moleküle kann daher helfen, Computersimulationen effektiver zu gestalten. Hierfür haben wir eine Lösung entwickelt.

Die Wechselwirkungen subzellulärer Strukturen werden in der Biologie auch mit bildgebenden Verfahren, z. B. der Elektronenmikroskopie, untersucht. Eine wichtige Aufgabe hierbei ist die Identifikation von subzellulären Strukturen, wie etwa Organellen oder Bestandteilen des Zellskelettes; erst dann kann deren Struktur und Funktion analysiert werden. Visualisierung spielt bei all diesen Fragen eine wichtige Rolle: Sie hilft bei der Identifikation der Strukturen, bei der Bildung und Verifikation von Hypothe-

sen und sie macht die biologischen Vorgänge verständlich. Wir haben eine Technik entwickelt, die es erlaubt, subzelluläre biologische Einheiten erstmalig interaktiv in atomarer Auflösung darzustellen.



◀ Abb. 1: Wege in einem Nanotransporter-Molekül: Die Abbildung zeigt Wege, auf denen ein zu transportierendes (kleines) Molekül in einen Nanotransporter gelangen kann. Links: Nanotransporter im Gesamtüberblick, aus zwei unterschiedlichen Blickrichtungen. Rechts: Detailausschnitte, die einen Blick ins Innere des Nanotransporters erlauben; rot hervorgehoben sind ausgewählte Wege. Von besonderer Bedeutung sind solche, die in das Innere des Nanotransporters führen, wie der im unteren Bild gezeigte Weg.

WEGE IN MOLEKÜLEN

Um herauszufinden, welche Oberflächenbereiche eines Makromoleküls für ein kleines Molekül oder ein Ion zugänglich sind, wird in dem neu entwickelten Verfahren zunächst das verallgemeinerte Voronoi-Diagramm der Van-der-Waals-Kugeln des Makromoleküls berechnet. Die Kanten des Voronoi-Diagramms repräsentieren diejenigen Wege im dreidimensionalen Raum, die maximalen Abstand zur Oberfläche des Makromoleküls haben. Sie stellen eine Obermenge der interessierenden Wege dar. Das zu bindende Molekül oder das Ion wird vereinfachend durch eine Kugel repräsentiert, deren Radius (bei konservativer Vorgehensweise) kleiner als der tatsächliche Radius gewählt werden kann. Im nächsten Schritt werden alle



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Biologische Strukturen bestehen aus molekularen Strukturen, die ihrerseits aus Atomen aufgebaut sind. Viele Fragen der Biologie, Medizin und Pharmakologie erfordern ein Verständnis der Wechselwirkungen zwischen molekularen Strukturen. In dem vorgestellten Projekt wurden Verfahren entwickelt, die es erlauben, Wege von kleinen Molekülen in großen molekularen Strukturen schnell zu berechnen und diese zu visualisieren. Weiterhin wurden computergrafische Techniken entwickelt, die es ermöglichen, biologische Strukturen und anorganische Nanostrukturen in atomarer Auflösung erstmals interaktiv darzustellen.

Wege entfernt, die eine kleinere Distanz zur Oberfläche des Makromoleküls aufweisen als der Radius der gewählten Kugel. Um eine möglichst übersichtliche Darstellung mit wenigen Wegen zu erhalten, werden weiterhin räumlich benachbarte Wege, die zum gleichen Ziel führen, entfernt. Das Ergebnis (s. Abb. 1) stellt eine gute Approximation der Wege dar, die es lohnt, mit molekulardynamischen Verfahren genauer zu untersuchen.

Ergänzend entwickelten wir verschiedene Visualisierungsmethoden, die es dem menschlichen Bearbeiter erleichtern, den räumlichen Verlauf der berechneten Wege im Molekül zu verstehen. Die Arbeit, in der diese neu entwickelten Verfahren vorgestellt wurden¹, wurde auf der wichtigsten Visualisierungskonferenz 2011 als einer der besten Beiträge ausgezeichnet.

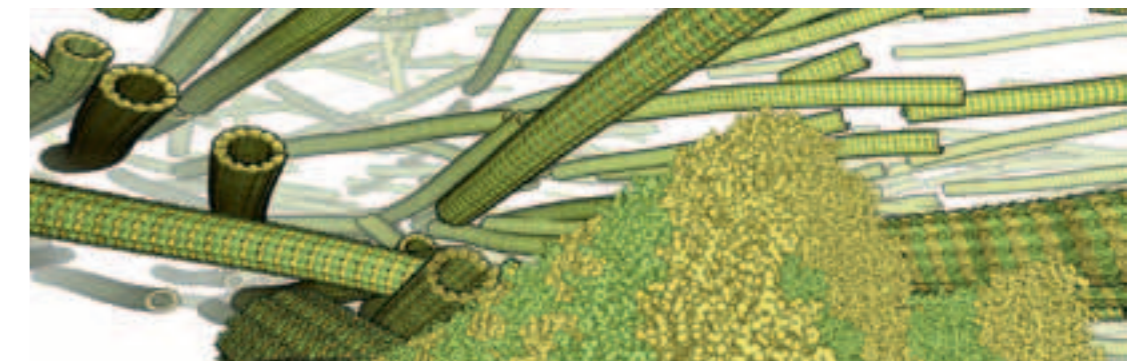
BIOLOGISCHE STRUKTUREN

Biologische Strukturen, wie z. B. das Zellskelett bestehend aus Mikrotubuli und Aktinfilamenten, werden in der Regel durch abstrakte geometrische Repräsentationen visualisiert. Solche Abstraktionen lassen den Betrachter leicht vergessen, dass es sich bei den betrachteten

Objekten um makromolekulare Strukturen handelt, also Strukturen, die aus Atomen aufgebaut sind. Will man biologische Zellstrukturen in atomarer Auflösung darstellen, ist man mit zwei Problemen konfrontiert: Erstens erreicht die Anzahl der Atome leicht einige Milliarden, so dass herkömmliche Visualisierungsverfahren keine interaktive Darstellung mehr zulassen. Zweitens ist eine atomare Auflösung nur dann interessant, wenn die biologischen Strukturen hinreichend nah am Betrachter sind, wohingegen Objekte, die in der Ferne liegen, eher flächenhaft und glatt darzustellen sind.

Wir haben ein Visualisierungsverfahren entwickelt, das beide Probleme löst². Um die große Menge an Atomen handhaben zu können, nutzen wir, dass biologische Strukturen aus einigen wenigen, sich sehr oft wiederholenden Teilen zusammengesetzt sind. Interaktivität erreichen wir durch eine gitterbasierte räumliche Indizierung. Schließlich berechnen wir die Beleuchtung der Objekte in Abhängigkeit der Distanz vom Betrachter, so dass weiter entfernte Objekte flächenhaft erscheinen, während bei nahen Objekten die einzelnen Atome erkennbar sind (Abb. 2).

▶ Abb. 2: Multiskalen-Visualisierung biologischer Strukturen: Die röhrenförmigen Objekte stellen Mikrotubuli dar, die einen Teil des Zellskelettes ausmachen. Im Vordergrund sind einzelne Atome zu erkennen, während in der Ferne liegende Mikrotubuli flächenhaft erscheinen.



¹ N. Lindow, D. Baum, and H.-C. Hege. **Voronoi-based extraction and visualization of molecular paths**. IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. 17:12, pp. 2025–2034, 2011.

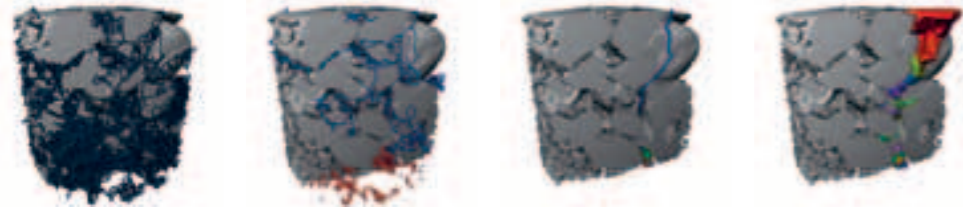
² N. Lindow, D. Baum, and H.-C. Hege. **Interactive rendering of material and biological structures on atomic and nanoscopic scale**. Comput. Graph. Forum, 2012, to appear

BILDANALYSE IN DER ZERSTÖRUNGSFREIEN WERKSTOFFPRÜFUNG

Bearbeitet von: Ulrike Homberg, Olaf Paetsch, Valentin Zobel, Daniel Baum, Steffen Prohaska

Förderung: BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Deutsche Forschungsgemeinschaft

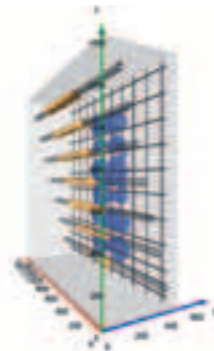
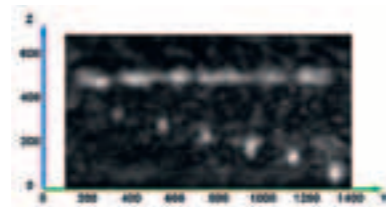
Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/asphalt, www.zib.de/jb2011/echobeton, www.zib.de/jb2011/porespace, www.zib.de/jb2011/rissbeton



Um die Eigenschaften von Materialien zu verstehen, kann es hilfreich sein, deren mikroskopische Struktur zu untersuchen. Dies hilft beispielsweise, ein grundlegendes Verständnis für Erosionsprozesse im Erdreich, die Verwitterung von Beton oder die akustischen Eigenschaften von Asphalt zu entwickeln. Technische Einsatzfelder sind die Überwachung von Bauwerken und die Weiterentwicklung von Materialien. Für viele Untersuchungen ist es wichtig, dass das Material durch die Untersuchung nicht zerstört wird. Offensichtlich ist dies für Bauwerke, deren Funktion durch die Untersuchung nicht beeinträchtigt werden darf. Aber auch in wissenschaftlichen Experimenten kann es hilfreich sein, die Entwicklungen im Material, z.B. bei Verwitterung, über einen längeren Zeitraum hinweg zu mehreren Zeitpunkten zu untersuchen. Erst am Ende der Untersuchungsreihe kann das Material zerstört werden. Für die früheren Zeitpunkte werden zerstörungsfreie Untersuchungsmethoden benötigt.

In diesem Schwerpunkt entwickeln wir Analyseverfahren für Bilddaten, die in der zerstörungsfreien Werkstoffprüfung gewonnen werden. Unser Kooperationspartner, die BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, verwendet verschiedene bildgebende Verfahren, darunter Computertomographie (CT), Bodenradar und Ultraschall. Eine Reihe von Analyseaufgaben lassen sich mit Hilfe von kommerziell verfügbarer Bildanalysesoftware

lösen. Manche Analysefragen gehen jedoch über das hinaus, was verfügbare Verfahren leisten. Ein Problem ist z.B., dass die Analysequalität in manchen Fällen nicht ausreicht oder sich nur zeitaufwändig kontrollieren lässt. In anderen Fällen ist die Analysefrage nur grob verstanden und kann erst im Rahmen einer fachübergreifenden Forschungskoope-ration präzisiert werden. Ein weiteres Problem ist, dass sich verschiedene Analyseverfahren für verschiedene Bilddaten nicht einfach kombinieren lassen, was für eine umfassende Analyse aber nötig wäre. Für all diese Probleme entwickeln wir am ZIB Lösungen.



◀ Abb. 1:
Porenpfadanalyse. Ange-schnittenes Korngefüge (grau) mit folgenden zusätzlichen Strukturen (von links nach rechts): vollständigem Porengraph (dunkelblau), der die Pfade durch das Gefüge repräsentiert; Teilgraph, der die erreichbaren Pfadcluster für eine ausgewählte Korngröße enthält – die farbigen Bereiche sind für größere Körner nur von oben (blau) bzw. unten (rot) erreichbar; einzelner Porenkanal; unterschiedlich eingefärbte Porenkörper entlang des ausgewählten Porenkanals.

◀ Abb. 2:
Ergebnisse von Mes-sungen am Probekörper mit unterschiedlichen Modalitäten. Oben: Schnitt durch fusionierten Datensatz aus Radar- und Ultraschallmessungen. Unten: Visualisierung der Messungen mit Kontext aus Bauteilzeichnungen; Isoflächen gelb: Reflexionen an den Stahlrohren; Isofläche blau: Reflexion an der Rückwand des Probekörpers.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Was passiert bei Erosion? Wie sind Werkstoffe aufgebaut? In diesem Schwerpunkt untersuchen wir gemeinsam mit unseren Kooperationspartnern die mikroskopische Struktur von Böden und Werkstoffen wie Beton oder Asphalt. Mit bildgebenden Verfahren wie Computertomographie lässt sich diese Struktur erfassen. Wir entwickeln Verfahren, um relevante Informationen aus den Bilddaten abzuleiten, damit man die Eigenschaften der Materialien besser verstehen kann. So wird es z.B. möglich, die Stabilität von Bauwerken zu bewerten oder verbesserte Materialien zu entwickeln.

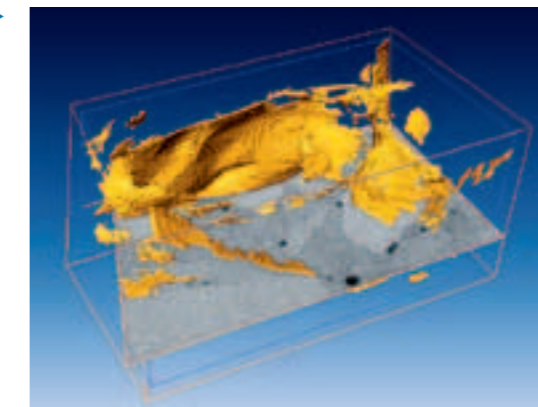
Im Rahmen eines Forschungsprojekts, das zum Ziel hat, die zugrundeliegenden Mechanismen des Erosionsphänomens Suffosion zu verstehen¹, entwickelten wir Bildanalyseverfahren, um die einzelnen Partikel in CT-Aufnahmen von Bodenproben zu segmentieren² und die Struktur des Porenraums zu analysieren^{3,4,5}. In Abb. 1 sind verschiedene Analysemöglichkeiten illustriert. Eine zentrale Idee ist, relevante Strukturen, wie Poren oder Porenengstellen, als topologische Strukturen der Distanztransformation des Porenraums zu beschreiben. Ausgehend von dieser Beschreibung entwickelten wir robuste Verfahren zur Identifikation der relevanten Strukturen in Bilddaten. Zusätzlich ermöglicht uns die Beschreibung der Porenstruktur in mathematisch topologischen Begriffen, eine Beziehung zwischen realen Strukturen in Bilddaten und idealisierten Geometrien herzustellen⁶, wie sie zur Modellierung von Erosionsprozessen eingesetzt werden.

Die Daten können interaktiv zusammen mit vorhandenen technischen Zeichnungen der Bauwerke zwei- und dreidimensional visualisiert werden, um eine umfassende Bewertung der Bauwerkqualität zu ermöglichen⁸. Abb. 2 zeigt eine kombinierte Visualisierung von technischen Zeichnungen des Probekörpers und Daten, die mittels Ultraschall und Bodenradar gewonnen wurden.

Weitere Forschungsthemen sind die Analyse von CT-Aufnahmen von Beton- und Asphaltproben. Dazu verglichen wir verschiedene Verfahren zur Risserkennung in Betonproben und entwickelten diese weiter. Damit ist es möglich, Risse in einer Aufnahme automatisiert zu identifizieren⁷. Abbildung 3 zeigt eine Isooberfläche eines Rissystems in 3D, die durch Template-Matching (Kreuzkorrelation) berechnet wurde. Daran anknüpfend wurde eine weitergehende Kooperation vereinbart, deren Ziel es ist, Risse in mehreren CT-Aufnahmen über Frost-Tau-Zyklen hinweg zu verfolgen und die zeitliche Entwicklung der Risse zu analysieren. Daneben entwickeln wir ausgehend von unseren Verfahren zur Porenraumanalyse Verfahren zur Analyse von hochaufgelösten CT-Aufnahmen von offenporigem Asphalt. Im Fokus der Untersuchungen stehen sowohl die Anordnung der Splittkörner und deren Verbindungen zueinander über Kontaktflächen und Bitumenschichten als auch die Verteilung und Verläufe von Hohlräumen. Da Asphalt neben Porenraum und Splittkörnern als dritte wichtige Komponente Bitumen enthält, können bestehende Verfahren nicht direkt angewendet werden, sondern müssen entsprechend erweitert werden.

Abb. 3: ▶

Darstellung eines Riss-systems in einer Beton-probe; das Rissystem wurde mit Hilfe des Template-Matching-Verfahrens berechnet.



In einem weiteren Forschungsprojekt entwickelten wir eine integrierte Visualisierungs-umgebung für Daten aus Bodenradar- und Ultraschallmessungen, die bei der Prüfung von Bauwerken wie Brücken erhoben werden.

¹ Semar et al.: **Conditions for suffosive erosion phenomena in soils**. In Proc. Work. Internal Erosion 2008, Nummer 21 der Schriftenreihe Geotechnik, 29–35. Bauhaus-Universität Weimar, 2009. ² Homberg et al.: **Determining geometric grain structures from X-ray micro-tomograms of graded soils**. In Proc. Work. Internal Erosion 2008, Nummer 21 der Schriftenreihe Geotechnik, 37–52. Bauhaus-Universität Weimar, 2009. ³ Binner et al.: **Identification of descriptive parameters of the soil pore structure using experiments and CT data**. In Proc. 5th Int. Conference on Scour and Erosion (ICSE-5), 397–407, 2010. ⁴ Homberg et al.: **Describing and analyzing the dual structures of porous media**. In Proc. 3D-Microstructure Meeting, 24–25, 2011. ⁵ Homberg et al.: **Automatic extraction and analysis of realistic pore structures from μ CT data for pore space characterization of graded soil**. In Proc. 6th Int. Conference on Scour and Erosion (ICSE-6), 2012 (in press).

⁶ Mehlhorn et al.: **Modelling and analysis of particle and pore structures in soils**. In Proc. Work. Internal Erosion 2008, Nummer 21 der Schriftenreihe Geotechnik, 53–60. Bauhaus-Universität Weimar, 2009. ⁷ Ehrig et al.: **Comparison of crack detection methods for analyzing damage processes in concrete with computed tomography**. In Proc. Int. Symp. Digital Industrial Radiology and Computed Tomography, 2011. ⁸ Streicher et al.: **3D-Visualisierung von Radar und Ultraschallecho mit ZIBAmira**, In Berichtsband 127-CD DGZfP-Jahrestagung 2011 ZfP in der Forschung, Entwicklung und Anwendung, 2011

WÄRMELEITUNGSKERN: SIGNATUR ZUR MULTISCALEVISUALISIERUNG VON TENSORFELDERN

Bearbeitet von: Valentin Zobel, Jan Reininghaus, Ingrid Hotz
Förderung: DFG Emmy-Noether-Programm
Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/hks.html

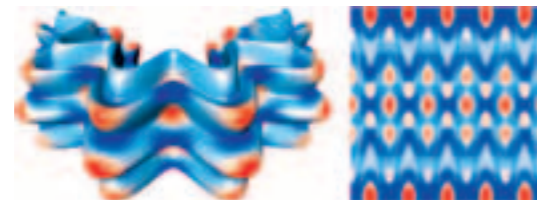


Die Identifikation ähnlicher Flächen oder Formen ist eine wichtige Fragestellung in der algorithmischen Geometrie. Dabei werden Flächen als ähnlich betrachtet, wenn sie isometrisch aufeinander abgebildet werden können. Dies ermöglicht zum Beispiel die gleiche Figur in unterschiedlichen Posen zu identifizieren (Abb. 1). Ein Ansatz mit solcher Fragestellung umzugehen sind sogenannte Flächensignaturen. Das Projekt beschäftigt sich mit der Definition und Analyse solcher Signaturen zum Vergleich von Flächen und, allgemeiner, metrischen Tensoren. Die entwickelten Signaturen beruhen auf dem Prozess der Wärmeleitung auf Oberflächen, der nur von deren Metrik abhängt. Der Zeitparameter in der Wärmeleitung unterstützt dabei auf natürliche Weise eine Multiskalenanalyse. Die Erweiterung der Signaturen zur Analyse symmetrischer Tensorfelder erschließt ein neues Anwendungsgebiet. Sie ermöglicht zum Beispiel einen Vergleich von Stresstensorfeldern, die eine große Bedeutung in den Materialwissenschaften haben (Abb. 4).

DER WÄRMELEITUNGSKERN ALS PUNKTSIGNATUR

Die Wärmeverteilung $\alpha(t, x)$ ist bestimmt durch die Wärmeleitungsgleichung $(\partial_t + \Delta_0)\alpha(t, x) = 0$

und eine Anfangsverteilung $\alpha(0, x)$. Dabei ist Δ_0 der Laplace-Beltrami-Operator – eine Verallgemeinerung des Laplace-Operators für die Anwendung auf nicht-euklidische Räume, z.B. gekrümmte Flächen. Ein Lösungsansatz für die Wärmeleitungsgleichung ist $\alpha(x, t) = \int k(t, x, y)\alpha(0, y)dy$, wobei $k(t, x, y)$ der sogenannte Wärmeleitungskern ist. Dieser kann mit Hilfe der Spektralanalyse des Laplace-Beltrami-Operators auf der Fläche berechnet werden (Abb. 3). Die Wärmeleitungskernsignatur (WKS), eingeführt von Sun et al.², ist definiert als $k(t, x, x)$. Der Wärmeleitungskern ist per Definition invariant unter isometrischen Transformationen, hebt aber die wesentlichen geometrischen Eigenschaften der Fläche hervor. Er enthält sämtliche Informationen über die Metrik, d.h. die Metrik der Fläche lässt sich aus dem Wärmeleitungskern rekonstruieren.



WÄRMELEITUNGSKERN FÜR 1-FORMEN

Eine Verallgemeinerung des oben vorgestellten Wärmeleitungskerns basiert auf dem Hodge-Laplace-Operator r welcher auf r -Formen wirkt³. Insbesondere 1-Formen, welche als Vektorfelder interpretiert werden können, sind für die Visualisierung von Vektor- und Tensorfeldern von Interesse. Für 1-Formen erhält man eine neue tensorwertige Signatur, von der sich mehrere invariante Skalare ableiten lassen. Die abgeleiteten Signaturen wurden im Rahmen des SHRE-Contests 2011¹ evaluiert. Neben den erwarteten Eigenschaften, wie der Invarianz unter

◀ Abb. 1: Vom Wärmeleitungskern für 1-Formen abgeleitete Signatur für eine Figur in verschiedenen Posen. Die Metrik der Fläche ändert sich hier nur geringfügig, entsprechend ist der Einfluss auf die Signatur gering. Folglich ist die Signatur auch gut geeignet, um deformierbare Objekte miteinander zu vergleichen.

◀ Abb. 2: WKS auf parametrisierter Fläche: Im linken Bild ist eine parametrisierte Fläche mit der zugehörigen Signatur zu sehen. Im rechten Bild wurde die Signatur direkt im Parameterraum berechnet und dargestellt. Die Basis dazu liefert der metrische Tensor der Fläche im Parameterraum. Da somit die dreidimensionale Darstellung der Fläche nicht benötigt wird, ist das Verfahren direkt auf positiv definite Tensorfelder anwendbar.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Erkennen von ähnlichen Formen und Flächen spielt in vielen Anwendungen eine große Rolle. Eine gute Grundlage dafür liefern Vergleiche auf Basis von Signaturen. Hier betrachten wir Signaturen, die auf der Wärmediffusion auf Flächen beruhen. Ihre besondere Stärke ist die Invarianz gegenüber isometrischen Transformationen. Damit können auch Figuren in unterschiedlichen Posen identifiziert werden. Weiterhin ermöglichen sie eine Analyse auf unterschiedlichen Skalen, die robust gegenüber kleineren Störungen der Fläche ist. Im Rahmen dieses Projektes wurde eine neue Punktsignatur eingeführt und auf Tensorfelder übertragen.

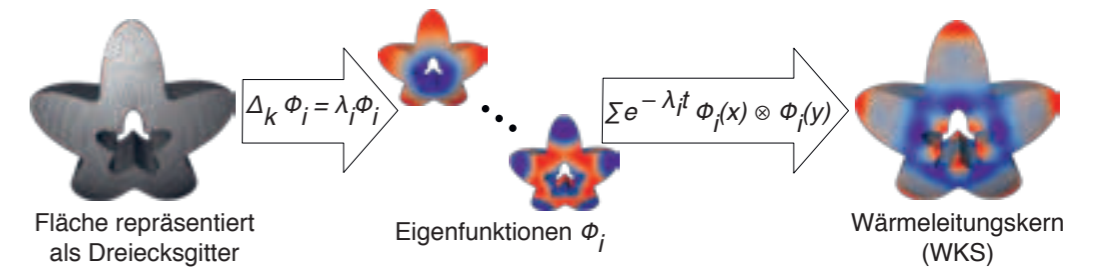
Isometrien und Skalierungen, hat sich gezeigt, dass die Signatur besonders robuste Ergebnisse auch für Ausschnitte aus Flächen liefert.

WKS ALS SIGNATUR FÜR TENSORFELDER

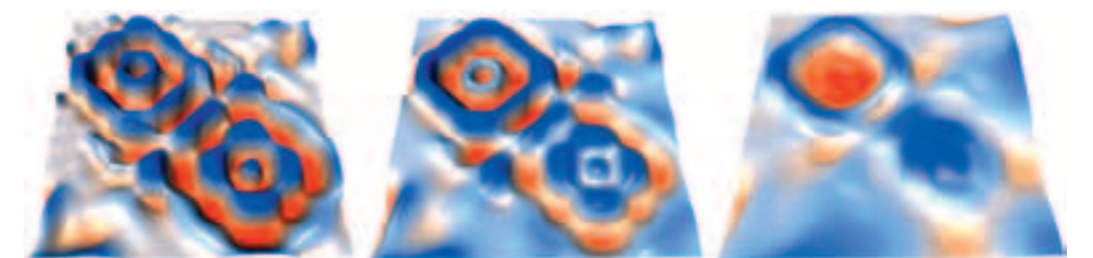
Eine parametrisierte Fläche definiert durch ihre Metrik im Parameterraum ein positiv definites Tensorfeld in der Ebene (Abb. 2). Umgekehrt lässt sich ein positiv definites Tensorfeld als Metrik einer parametrisierten Fläche auffassen. Entsprechend lassen sich die vom Wärmeleitungskern abgeleiteten Signaturen auch für Tensorfelder berechnen und darstellen. Die Verfahren für Flächen können daher auch auf Tensorfelder angewendet werden. Die Berechnung des Wärmeleitungskerns für Tensorfelder erfordert allerdings wesentliche Modifikationen der für Flächen üblichen Verfahren. Während bei

Flächen die Einbettung in den dreidimensionalen Raum ausgenutzt werden kann, müssen bei Tensorfeldern alle Berechnungen unter ausschließlicher Verwendung des metrischen Tensors durchgeführt werden. Positiv definite symmetrische Tensoren können auf diese Weise direkt analysiert und visualisiert werden. Allgemeinere Tensoren, wie zum Beispiel Spannungstensoren, sind in der Regel nicht positiv definit. Sie müssen zunächst durch eine geeignete Transformation auf positiv definite Tensoren abgebildet werden. Interpretiert man die Spannungstensoren als Generator einer Deformation, ergibt sich dabei eine natürliche Abbildung. Abbildung 4 zeigt ein Beispiel für einen Schnitt durch einen Block, auf den zwei Punktkräfte wirken. Rot weist dabei auf auf starke expansive und blau auf kompressive Kräfte hin.

▶ Abb. 3: Algorithmus zur Berechnung der WKS. Dabei sind die λ_i die Eigenwerte des Laplace-Operators und die ϕ_i die dazugehörigen Eigenfunktionen.



▶ Abb. 4: Spannungstensorfeld in drei Skalen (fein/mittel/grob): Die Signatur für ein Tensorfeld, das das elastische Verhalten eines Blocks darstellt, auf den eine ziehende und eine drückende Kraft wirken.



¹ E. Boyer, A. M. Bronstein, M. M. Bronstein, B. Bustos, T. Darom, R. Horaud, I. Hotz, Y. Kelle, J. Keustermans, A. Kovnatsky, R. Litman, J. Reininghaus, I. Sipiran, D. Smeets, P. Suetens, D. Vandermeulen, A. Zaharescu, and V. Zobel. SHREC 2011: **Robust Feature Detection and Description Benchmark**. In Proc. Eurographics Workshop on 3D Object Retrieval (3DOR'11), 2011 ² J. Sun, M. Ovsjanikov, and L. Guibas. **A concise and provably informative multi-scale signature based on heat diffusion**. Computer Graphics Forum (SGP'09), 28(5):1383–1392, 2009 ³ V. Zobel, J. Reininghaus, and I. Hotz. **Generalized heat kernel signature**. Journal of WSCG, International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision, 19:93–100, 2011

„RICHTIG IN FORM“ – MATHEMATISCHE FORMANALYSE

Bearbeitet von: Carl Martin Grewe, Hans Lamecker, Heiko Ramm, Stefan Zachow

Kooperation: Uni Kiel (M. Hermanussen), Uni Potsdam (Chr. Scheffler), Uni Freiburg (U. Wittwer-Backofen), Uni Calgary (C. Anglin),

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Stryker Trauma, Stryker Osteosynthesis, 1000shapes GmbH

Kofinanzierung EU FP7, Uni Calgary, Stryker GmbH & Co KG, BAM

Weitere Informationen unter: www.zib.de/visual/medical



◀ Abb. 1:
Die Analyse des Formenraumes von über 300 Beckenknochen offenbart Gruppierungen (Cluster), innerhalb derer und zwischen denen quantitative Vergleiche durchgeführt werden können.

Menschen vergleichen und klassifizieren dreidimensionale physische Objekte anhand ihrer Form. Typischerweise werden Formen über einfache Maßzahlen, wie z. B. euklidische Längemaße, quantitativ beschrieben (Abb. 1). Mittlerweile stehen in der Messtechnik eine Vielzahl von Techniken zur Erfassung von Formen zur Verfügung, die eine hohe Genauigkeit und Ortsauflösung bieten (Photogrammetrie, taktile Messverfahren, Tomografie). Solche Verfahren liefern pro Messung große Mengen an formbeschreibenden Daten, deren effiziente Auswertung neue Konzepte erfordert. Wir entwickeln Verfahren, die es erlauben, komplexe Formen mathematisch zu beschreiben, sie zu vergleichen, Formvariation mit statistischen Verfahren zu analysieren und diese mit explorativen Visualisierungstechniken zugänglich zu machen.

Der mathematische Zugang für einen Formvergleich basiert auf sogenannten Formdeskriptoren, die Eigenschaften von Formen quantitativ beschreiben. Es gibt anschauliche Maße, wie z. B. Höhe oder Breite, die jedoch von der Orientierung im Bezugssystem abhängen. Integrale Maße, wie Oberfläche oder Volumen, lassen sich zwar gut vergleichen, aber sie be-

schreiben die Form nicht bzw. nicht eindeutig. Eine eindeutige Charakterisierung von Formen bieten z. B. Spektralmaße.² Diese eignen sich jedoch nicht für den Vergleich der Variation korrespondierender, lokaler Merkmale. Am ZIB werden daher Formdeskriptoren entwickelt, die Form, basierend auf lokaler Information (Korrespondenzen/Ordnung), mit hoher Detailauflösung beschreiben^{3,4}.

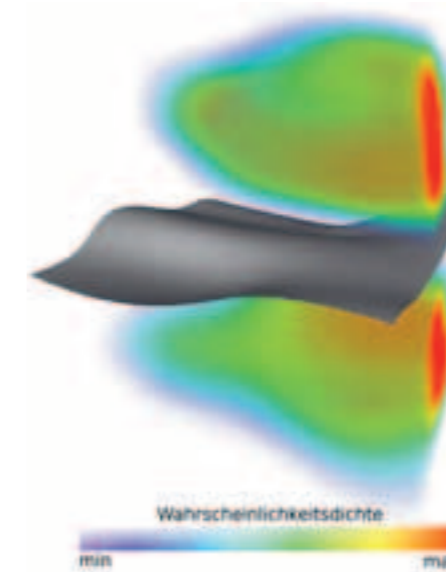
Jede Wertekonstellation von Formdeskriptoren bildet einen Punkt in einem mathematischen Raum, dem sogenannten Formenraum. Die Herausforderung liegt darin, Formdeskriptoren so zu definieren, dass der resultierende Formenraum eine Mannigfaltigkeit mit Riemannscher Metrik ist. Der quantitative Formvergleich basiert somit auf der Distanz zweier Elemente in diesem gekrümmten Raum; diese ist im Allgemeinen aber nicht trivial zu berechnen. Detailgenaue Formdeskriptoren führen zudem zu hochdimensionalen Formenräumen. Dies erschwert die Interpretation der darin enthaltenen Information. Wir nutzen Methoden zur Dimensionsreduktion (MDS, PCA, ICA, etc.), um wesentliche Freiheitsgrade zu extrahieren.

Form: Als Form eines Körpers bezeichnet man die geometrische Information, die unabhängig von Ähnlichkeitstransformationen (Rotation, Verschiebung, Skalierung) ist.¹ Berücksichtigt man beim Formvergleich auch die Größe, entfällt die Invarianz gegenüber Skalierung.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Klassifikation und Vergleich von Formen spielen in der Wissenschaft eine wichtige Rolle. In der Medizin bewertet man Gesundheitszustände z. B. anhand der Form anatomischer Strukturen und in der Biologie können Gattungen und Arten durch ihre Form unterschieden werden. Am ZIB werden Verfahren entwickelt, die es erlauben, komplexe Formen mathematisch zu beschreiben, sie zu vergleichen, Formvariationen zu analysieren und diese anschaulich zu kommunizieren. Die mathematische Formanalyse bildet u. a. eine Grundlage für die Aufstellung und Verifikation von Hypothesen in der Morphologie.

▶ Abb. 2:
Visualisierung der geschlechtsspezifischen Wahrscheinlichkeitsdichte von Beckenknochen im Formenraum (nach Dimensionsreduktion), basierend auf Kerndichteschätzern. Dargestellt ist die optimale Trennfläche zwischen den Geschlechtern.



Weiterhin setzen wir Methoden des maschinellen Lernens ein, um Wahrscheinlichkeitsverteilungen im Formenraum zu approximieren und Zusammenhänge zwischen Form und anwendungsspezifischen Parametern zu untersuchen (Abb. 2). Die von uns entwickelten Verfahren und interaktiven Werkzeuge zur visuellen Exploration von Formenräumen bilden

▶ Abb. 3:
Altersabhängige Formveränderung des Gesichtes im Kindes- und Jugendalter, dargestellt am männlichen und weiblichen Durchschnittsgesicht (Stichprobe aus 52 Gesichtern).



eine Grundlage für die Aufstellung und Verifikation von Hypothesen in der Morphologie.

Methoden zur statistischen Analyse komplexer Formen eröffnen neue Möglichkeiten für interessante Fragestellungen aus unterschiedlichen wissenschaftlichen Disziplinen. Die im Berichtszeitraum bearbeiteten Themen sind: (1) in der Medizin, die Früherkennung von Syndromen anhand des Vergleiches von individuellen mit typischen Körperentwicklungen während des kindlichen bzw. jugendlichen Wachstums (Abb. 3) sowie die verbesserte Erkennung von Pathologien in der Diagnostik⁵, (2) im Produktdesign, die Bestimmung zielgruppenorientierter, optimaler Implantatformen^{6,7} im Gegensatz zur individuellen Fertigung von Implantaten bzw. Instrumenten oder der eines Standardtyps („one size fits all“), (3) in der zerstörungsfreien Materialprüfung, die Beurteilung, ob Fertigungsteile bzgl. ihrer gesamten Form innerhalb eines Toleranzbereiches liegen, (4) in der Biologie, die Definition von Gattungen und Arten sowie eine entsprechende Klassifikation und (5) in der Anthropologie bzw. Biometrie, die Herleitung neuer Klassifikationsmerkmale und deren Nutzung.⁸

¹ I. L. Dryden und K. V. Mardia: **Statistical Shape Analysis**. John Wiley & Sons, 1998; Def. 1.2. ² M. Reuter, F.-E. Wolter und N. Peinecke: **Laplace-Beltrami spectra as “Shape-DNA” of surfaces and solids**. Computer-Aided Design 38 (4), pp.342–366, April, 2006. ³ H. Lamecker: **Variational and Statistical Shape Modeling for 3D Geometry Reconstruction**. Dissertation am Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin, 2008. ⁴ A. Günther, H. Lamecker, M. Weiser: **Direct LDDMM of Discrete Currents with Adaptive Finite Elements Proc. 3rd MICCAI Workshop on Mathematical Foundations of Computational Anatomy (X. Pennec et al., eds.), pp. 1–15, 2011.**

⁵ J. v. Berg, J. Dworzak, T. Klinder, A. Kreth, D. Manke, H. Lamecker, S. Zachow, C. Lorenz: **Temporal subtraction of chest radiographs compensating pose differences**. Proc. SPIE – Medical Imaging (B. Dawant and D. Haynor, eds.), vol. 7962, 2011. ⁶ M. Bindernagel, D. Kainmüller, H. Ramm, H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege: **An Articulated Statistical Shape Model of the Human Knee**. Proc. Bildverarbeitung für die Medizin (BVM) (H. Handels et al., eds.), Informatik aktuell, Springer, pp. 59–63, 2011. ⁷ S. K. Saevarsson, G. B. Sharma, S. Montgomery, K. C. T. Ho, H. Ramm, R. Lieck, S. Zachow, and C. Anglin: **Kinematic Comparison Between Gender Specific and Traditional Femoral Implants**. Proc. of the 11th Alberta Biomedical Engineering (BME) Conference (Poster), 2011. ⁸ C.-M. Grewe, H. Lamecker, S. Zachow: **Digital Morphometry: The Potential of Statistical Shape Models**. Proc. 9. Internationaler Kongress der Gesellschaft für Anthropologie (GfA), 2011.

PROJEKTE DER ABTEILUNG VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: www.zib.de/visual/projects

AMIRA/AVIZO

Bearbeitet von: M. Leborgne, S. Schubert, D. Baum, S. Prohaska

Kooperation: Visage Imaging, Berlin; VSG Bordeaux

Förderung: Visage Imaging, Berlin; VSG Bordeaux

Inhalt: Überführung neuer Algorithmen in die kommerzielle Software Amira/Avizo

ANTHROPOLOGIE

Bearbeitet von: M. Grewe, H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: Universitätskliniken Kiel und Freiburg; Inst. für Biochemie und Biologie der Universität Potsdam

Inhalt: Entwicklung und Einsatz von Verfahren zur 3D-Form- und Wachstumsanalyse von Gesichtern bei Kindern und Jugendlichen

ASPHALT

Bearbeitet von: U. Homberg, D. Baum, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

Inhalt: Entwicklung von Bildanalyseverfahren für die Analyse von Asphalt

ATLASBASIERTE 3D SEGMENTIERUNG

Bearbeitet von: A. Günther, H. Lamecker, M. Weiser, H.-C. Hege, S. Zachow

Kooperation: Charité Berlin; INRIA Sophia Antipolis; MATHEON Projekte F1, F4, F6, F10, F13, A17, C28; DKFZ Heidelberg; MIC U Lübeck; MPI Jena; Philips Research Europe; 1000shapes GmbH; Visage Imaging GmbH

Förderung: DFG MATHEON, Projekt F2
Inhalt: Korrespondenzfindung zwischen geometrischen Formen mit adaptiven finiten Elementen; automatische 3D Rekonstruktion von anatomischen Strukturen aus medizinischen Bilddaten auf Basis von Formwissen

AVR

Bearbeitet von: A. Kratz, J. Reininghaus, I. Hotz

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Entwicklung einer adaptiven Methode höherer Ordnung für Volumen-Rendering

BIOSPHERE3D

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

Kooperation: Lenné3D Berlin

Inhalt: Entwicklung eines Softwaresystems zur Visualisierung von Landschaften mit Level-of-Detail-Verfahren

BONE HEALING

Bearbeitet von: D. Baum, S. Prohaska

Kooperation: MPI Kolloid- und Grenzflächenforschung Potsdam-Golm

Förderung: MPI Kolloid- und Grenzflächenforschung Potsdam-Golm

Inhalt: Verfahren zur Integration von Informationen aus verschiedenen 2D- und 3D-Bildgebungsverfahren in ein einheitliches Referenzsystem

CEREBRAL ANEURYSMS

Bearbeitet von: K. Pöthkow, C. Petz, I. Hotz, S. Zachow, H.-C. Hege

Kooperation: Charité Berlin, Labor für Biofluidmechanik, Helios Klinikum Berlin

Förderung: DFG

Inhalt: Rekonstruktion von zerebralen Aneurysmen; Analyse und Visualisierung von Blutströmungen; Suche nach geometrischen und strömungstechnischen Faktoren, die das Rupturrisiko beeinflussen

CORTEX IN SILICO

Bearbeitet von: V. Dercksen, H.-C. Hege

Kooperation: MPI Florida; MPI Neurobiologie Martinsried; Uni Heidelberg

Förderung: MPI Neurobiologie Martinsried
Inhalt: Methoden zur bildbasierten Rekonstruktion von anatomisch realistischen neuronalen Netzwerken und zur Analyse der neuronalen Konnektivität (für das Barrelfeld des primären somatosensorischen Cortex der Ratte)

CRYOREC

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

Kooperation: MPI Biochemie Martinsried; Univ. Saarland

Inhalt: Rekonstruktion von subzellulären Strukturen, insbesondere Aktin-Filamenten, auf Basis von Kryo-Elektronentomographie-Aufnahmen

CVT

Bearbeitet von: J. Reininghaus, I. Hotz

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Entwicklung von Verfahren der kombinatorischen Skalar- und Vektorfeld-Topologie

ECHOBETONVIZ

Bearbeitet von: O. Paetsch, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

Inhalt: Visualisierung von Daten aus Bodenradar- und Ultraschallmessungen an Betonbauteilen

FLOW VIS

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

Kooperation: Charité Berlin, Labor für Biofluidodynamik

Inhalt: Methoden zur Extraktion und Visualisierung von Merkmalen in Strömungsfeldern auf gekrümmten Oberflächen, insbesondere an der Grenzschicht zur umströmten Geometrie

GESICHTSCHIRURGIE – CAS

Bearbeitet von: L. Lubkoll, A. Schiela, P. Deuflhard, M. Weiser, S. Zachow

Kooperation: Universitätskliniken Wien, Hannover, Köln; Privatklinik Prof. Sailer in Zürich

Förderung: Universität Wien (2008/2009); Prof. Sailer, Zürich (2011/2012)

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

GLYPH PLACEMENT

Bearbeitet von: A. Kratz, I. Hotz

Kooperation: IDAV, University of California Davis

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Verfahren zur Erzeugung von Punktverteilungen für die glyph-basierte Tensorfeldvisualisierung und Texturgenerierung

HNO-CHIRURGIE – NOSE

Bearbeitet von: C. Petz, S. Zachow

Kooperation: Asklepios Klinik Birkenwerder; Charité Berlin, Labor für Biofluid-dynamik

Inhalt: HNO-Chirurgie unter Berücksichtigung der optimalen Nasenatmung

IMPLANTATE

Bearbeitet von: H. Ramm, M. Grewe, H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: Internat. Implantathersteller
Förderung: Implantathersteller

Inhalt: Entwicklung verbesserter Verfahren zur Rekonstruktion anatomischer Strukturen aus medizinischen Bilddaten, 3D Formanalyse für das Implantatdesign

KNEE-KINEMATICS

Bearbeitet von: H. Ramm, R. Lieck, D. Kainmüller, S. Zachow

Kooperation: Uni Calgary, Canada – Centre for Bioengineering Research and Education

Förderung: Uni Calgary

Inhalt: Modellgestützte Rekonstruktion von anatomischen Strukturen und Implantaten aus medizinischen Bilddaten, Analyse von Form und beweglichen Freiheitsgraden von Gelenkstrukturen

MICROTUBULES

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

Kooperation: MPI molekulare Zellbiologie und Genetik; EMBL Heidelberg

Förderung: MPI molekulare Zellbiologie und Genetik, Dresden

Inhalt: Segmentierung von subzellulären Strukturen, insbesondere von Mikrotubuli, aus Elektronentomogrammen

MOL ANALYSIS

Bearbeitet von: N. Lindow, D. Baum, H.-C. Hege

Kooperation: ZIB-Gruppe Mathematischer Moleküilentwurf; Uni Saarbrücken (Materialforschung); FU Berlin (Physik)

Förderung: ZIB

Inhalt: Multiskalenvisualisierung von molekularen Systemen; Berechnung von Transportpfaden in komplexen molekularen Systemen

MXL

Bearbeitet von: H. Ramm, M. Grewe, H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: HU Berlin (Charité); Universitäten Southampton, Delft, Leiden, Bologna; ESI Group; SCS Mailand

Förderung: EU FP7

Inhalt: Entwicklung verbesserter Verfahren zur Rekonstruktion anatomischer Strukturen aus medizinischen Bilddaten, zur Aufbereitung von FE-Modellen und zur biomechanischen Modellierung und Analyse für Planungen von Gelenkoperationen

NUMREL VIS

Bearbeitet von: V. Zobel, I. Hotz, H.-C. Hege

Kooperation: Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut), Potsdam

Förderung: MPG

Inhalt: Entwicklung neuer Methoden für die Analyse und Visualisierung von Vektor- und Tensor-Feldern aus numerischen Simulationen zur speziellen und allgemeinen Relativitätstheorie

PALÄONTOLOGIE

Bearbeitet von: D. Günther, S. Zachow

Kooperation: FU Berlin; Universität Bochum

Inhalt: Entwicklung und Einsatz von Bildanalyseverfahren für die zerstörungsfreie Rekonstruktion und Formanalyse von fossilen Strukturen

PERGAMON

Bearbeitet von: M. Klindt, M. Clasen, D. Baum, S. Prohaska, H.-C. Hege

Kooperation: FU Berlin; Pergamonmuseum, Berlin; DAI Berlin; TU Cottbus; Uni Köln; Lenné3D Berlin

Förderung: BMBF

Inhalt: Virtuelle Rekonstruktion des antiken Pergamons und Kontextualisierung von Skulpturen

PORE SPACE

Bearbeitet von: U. Homberg, D. Baum, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin; Uni Weimar;

FH Leipzig

Förderung: DFG

Inhalt: Entwicklung von Verfahren zur bildbasierten Analyse von Gefüge- und Porenstrukturen

QM MOL

Bearbeitet von: C. Mielack, H.-C. Hege

Kooperation: FU Berlin; U Potsdam

Förderung: DFG

Inhalt: Entwicklung von Verfahren zur Visualisierung von quantenmechanischen Prozessen in Molekülen

RISSBETON

Bearbeitet von: O. Paetsch, D. Baum, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

Inhalt: Entwicklung von Bildanalyseverfahren für die Identifikation von Rissflächen in Beton zur zerstörungsfreien Werkstoffprüfung

SIBILL

Bearbeitet von: D. Kainmüller, H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege

Kooperation: Charité Berlin; FU Berlin; IMIC Lübeck; Implantathersteller

Förderung: DFG SFB 760 (2007–2011)

Inhalt: Entwicklung von Verfahren zur bildbasierten, patienten-spezifischen Rekonstruktion der Anatomie des Beins für Biomechanik-Simulationen

SENSOR SEGMENTATION

Bearbeitet von: C. Auer, I. Hotz

Kooperation: IDAV, University of California Davis

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Entwicklung von topologie-basierten Verfahren zur Segmentierung und Texturierung von Tensorfeldern auf 2D Mannigfaltigkeiten

SENSOR VIS

Bearbeitet von: A. Kratz, I. Hotz

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Entwicklung von Verfahren zur Visualisierung und explorativen Analyse von 3D-Tensorfeldern

UNCERTAINTY VIS

Bearbeitet von: K. Pöthkow, B. Weber, C. Petz, H.-C. Hege

Kooperation: Uni Magdeburg

Inhalt: Entwicklung von probabilistischen Verfahren zur Extraktion und Visualisierung von geometrischen und topologischen Merkmalen in unscharfen Daten

VIGOR++

Bearbeitet von: A. Wiebel, H.-C. Hege

Kooperation: Delft University of Technology; University College London Hospitals;

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich; Biotronics3D Ltd; Universiteit van Amsterdam (Academisch Medisch Centrum);

Vodera Ltd

Förderung: EU FP7

Inhalt: Interaktive Visualisierung und Analyse von Bilddaten, insbesondere dynamischen kontrastmittelverstärkten Magnetresonanztomographien (DCE-MRI) des Abdomens, für die Diagnose und Beobachtung des Krankheitsverlaufs bei Morbus Crohn

WKS

Bearbeitet von: V. Zobel, J. Reininghaus, I. Hotz

Förderung: DFG Emmy Noether

Inhalt: Flächenanalyse auf Basis von Wärmeleitungskernsignaturen.



OPTIMIERUNG



$$\sum_{i=1}^9 x_{ijk} = 1 \quad \forall j, k \in \{1, \dots, 9\}$$

$$\forall i, k \in \{1, \dots, 9\}$$

$$\forall i, j \in \{1, \dots, 9\}$$

$$-i, 3m+j, k =$$

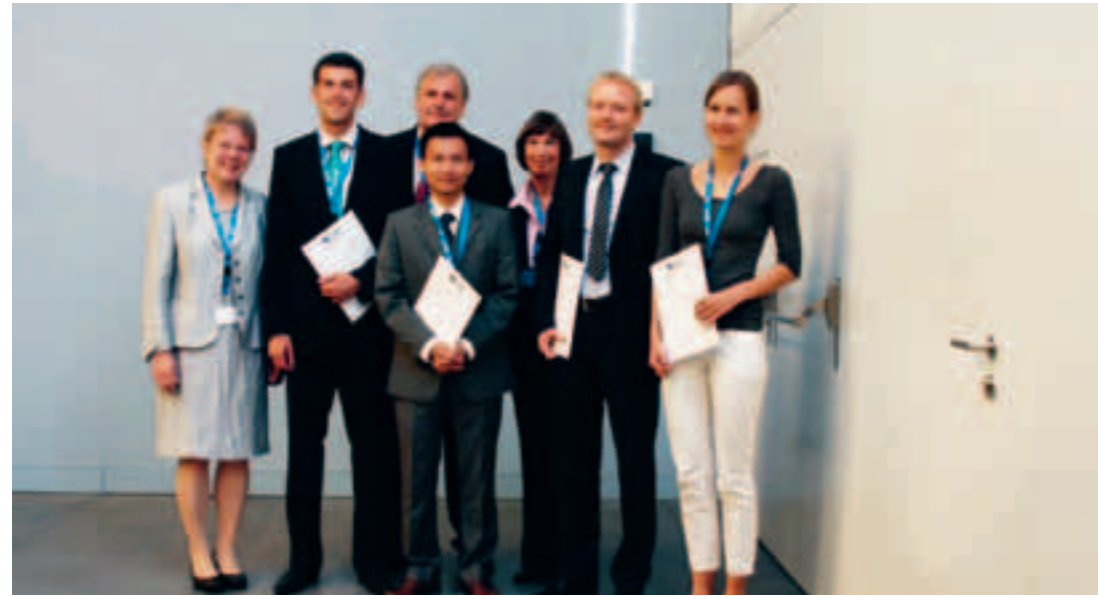
$$\forall k, m \in \{0, 1, 2\}$$

$$7 \quad \forall i$$



OPTIMIERUNG

Leitung: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel, PD Dr. habil. Ralf Borndörfer
Weitere Informationen unter: www.zib.de/optimierung.html



◀ Nam Dúng Hoàng (vorne in der Mitte) gewinnt auf der OR 2011 in Zürich einen Dissertationspreis der Gesellschaft für Operations Research (GOR).

MISSION

Verfahren der Mathematischen Optimierung sind heute aus vielen Bereichen der Wirtschaft und der Gesellschaft nicht mehr wegzudenken und gewinnen weiter an Bedeutung. Die Entwicklung von Methoden zur integrierten Planung mehrerer Ebenen von Netzwerken, zur gleichzeitigen Berücksichtigung ökonomischer, ökologischer und sozialer Kriterien, zur Behandlung von unsicheren Daten, von nichtlinearen Wirkungszusammenhängen und von menschlichem Verhalten sind unsere aktuellen Forschungsfelder.

STRUKTUR

Die Abteilung besteht aus drei Arbeitsgruppen:

- **AG Verkehr und Logistik AG** (Ltg. PD Dr. habil. Ralf Borndörfer)
- **AG Lineare und nichtlineare ganzzahlige Optimierung** (Ltg. Dr. Thorsten Koch)

- **AG Telekommunikation** (Ltg. Dr. Axel Werner)

SPIN-OFFS

- **atesio**¹: Telekommunikationsoptimierung
- **Intranetz**²: Informationslogistik
- **LBW**³: Verkehrsoptimierung
- **TASK**: Wartungs- und Beratungsleistungen für die **ZIB Optimization Suite**⁴

PREISE UND AUSZEICHNUNGEN

- **Tobias Achterberg**: INFORMS Optimization Prize for Young Researchers⁵
- **Ralf Borndörfer**: Listenplatz 2 für eine W2-Professur an der FAU Erlangen-Nürnberg
- **Gerald Gamrath, Olga Heismann, Jonas Schweiger**: DMV-Studierendenpreise für besonders gute Abschlussarbeiten
- **Martin Grötschel**: Ehrendoktorwürde der Universität Augsburg⁶; IBM Faculty Award⁷; Ehrenprofessur der TU München⁸

¹ www.atesio.de ² www.intranetz.de ³ www.lbw-berlin.de ⁴ zibopt.zib.de ⁵ www.informs.org/Community/Optimization-Society/Optimization-Society-Prizes/Young-Researchers/2011 ⁶ www.uni-augsburg.de/upd/2011/juli-sept/2011_136/ ⁷ download.boulder.ibm.com/ibmdl/pub/software/dw/university/facultyawards/2011_faculty_recipients.pdf ⁸ portal.mytum.de/pressestelle/meldungen/NewsArticle_20111103_191259

Marika Karbstein hat die ▶
 Ultimative MATHEON-
 Adventskalenderaufgabe
 gestellt, Günter Ziegler
 überreicht den Preis.



- **Nam Dúng Hoàng**: GOR Dissertationspreis 2011⁹ (Bild links)
- **Marika Karbstein**: Ultimative MATHEON-Adventskalenderaufgabe 2011¹⁰
- **Andreas Löbel, Christof Schulz**: Step 3 in der SPEC¹¹ CPUv6¹² für **505.mcf**
- **Olga Heismann**: Clara-von-Simson-Preis

AG VERKEHR UND LOGISTIK¹³

Große Netzwerke, komplexe technische Nebenbedingungen, das menschliche Verhalten und regulatorische Änderungen stellen die AG in diesem klassischen und dennoch sehr aktiven Gebiet vor spannende Herausforderungen. Im MATHEON-Projekt B15 zur Angebotssplanungs im öffentlichen Nahverkehr wurde das Nahverkehrsnetz der Stadt Potsdam optimiert (S. 58). Im Projekt Optimierung der LKW-Autobahnmautkontrolle für das Bundesamt für Güterverkehr steht ein Praxistest unmittelbar bevor. Neuartige Konfigurationsmodelle erlauben die Behandlung riesiger Eisenbahnmodelle im BMBF-Projekt Optimale Zugführung im Schienengüterverkehr, im MATHEON-Projekt B22 zur Zugumlaufplanung, im Projekt zur ICE-Umlaufoptimierung mit DB FERNVERKEHR und im erfolgreich abgeschlossenen DAAD/CNPq-Projekt zum Depotmanagement.

AG LINEARE UND NICHTLINEARE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG¹⁴

Im Jahr 2011 haben wir die ZIB Optimization Suite weiter verbessert; es gab im Laufe des Jahres vier Releases. Wir konnten dadurch unseren Performance-Vorsprung gegenüber anderen frei verfügbaren MIP-Lösern weiter ausbauen. Darüber hinaus haben wir wesentliche Fortschritte bei der Berechnung exakter Lösungen und auf dem Gebiet der massiven Parallelisierung erzielt sowie die Anzahl der Problemklassen erweitert, die mit unserer

Software effektiv gelöst werden können. Zur Unterstützung des Projekts „FORNE – Optimierung von Gastransportnetzen“ haben wir die Funktionalitäten des Lösers **SCIP** für nichtlineare, nichtkonvexe Optimierungsprobleme weiter ausgebaut. In den Gas-Projekten konnte ein wichtiger Meilenstein erreicht werden: die Optimierung des ersten von drei großen Gastransportnetzen unseres Industriepartners. Mit Hilfe eines webbasierten Onlinelösers sowie eines neuen Rechenclusters mit 256 Cores testen wir unsere Algorithmen nun durchgängig auf immer größeren und komplexeren Netzwerken.

AG TELEKOMMUNIKATION¹⁵

Der Ausbau moderner Telekommunikationsnetze liefert u.a. aufgrund technischer Veränderungen oder neuer Managementkonzepte immer wieder neue und interessante mathematische Fragen, die in der AG Telekommunikation untersucht und gelöst werden. Eine wichtige Problematik ist die des steigenden Energieverbrauchs der IKT-Netze (siehe S. 62), mit der sich das 2011 gestartete, von der BMWi-Initiative IT2Green¹⁶ geförderte Projekt DESI (Durchgängig energiesensible IKT-Produktion) auseinandersetzt. Hier fließen auch Methoden aus den weiteren aktuellen Projekten ein, vor allem aus dem Bereich der Multilayer-Netze (MATHEON-Projekt B3 Integrierte Planung von Multilayer-Telekommunikationsnetzen) und der robusten Optimierung (BMBF-Projekt ROBUKOM). Im DFG-Projekt Multiperiod Network Optimization wurden neue Modelle zum Netzwerkdesign bei unsicherem Bedarf entwickelt. Erfolgreich abgeschlossen wurde 2011 das BMBF-Projekt FTTX-PLAN zur optimierten Planung optischer Zugangsnetze. Ein Nachfolgeprojekt wurde zusammen mit Kollegen aus Wien konzipiert und wird Anfang 2012 beginnen.

⁹ <https://gor.upb.de/index.php?id=196> ¹⁰ www.matheon.de/download.asp?File=8142_pmaktuell.pdf ¹¹ Standard Performance Evaluation Corporation, eine Organisation von Hardwareherstellern zum Benchmarking von CPUs ¹² www.spec.org/cpuv6 ¹³ www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte.html ¹⁴ www.zib.de/de/optimierung/mip.html ¹⁵ www.zib.de/de/optimierung/telekommunikation.html ¹⁶ www.it2green.de

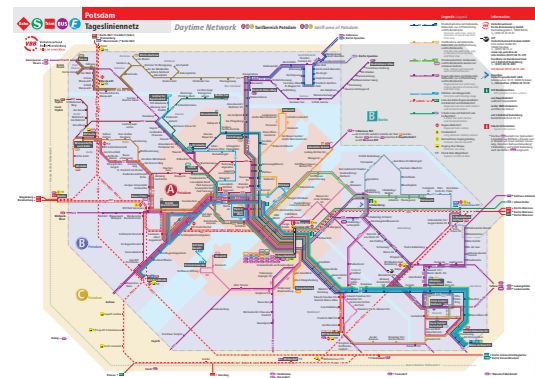
LINIENOPTIMIERUNG IN POTSDAM

DIE EMPFUNDENE REISEZEIT SINKT UM 6%

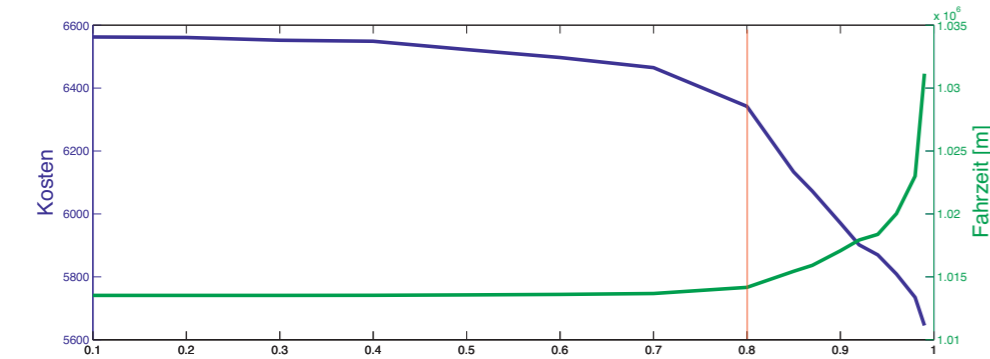
Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Marika Karbstein

Kooperation/Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Verkehr in Potsdam GmbH (ViP)

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/matheon-b15



In jedem Nahverkehrsunternehmen müssen eine Reihe von Planungsproblemen gelöst werden. Dazu gehören strategische Planungsprobleme, die die Infrastruktur (z. B. Ausbau des Schienennetzes), die Linienführungen und die genauen Abfahrtszeiten an Haltestellen betreffen, sowie Probleme des laufenden Betriebs, z. B. Dienstplanung, Fahrzeugeinsatzplanung und Behandlung von Störfällen¹. Ein Kernproblem ist die Linienplanung. Sie beinhaltet die Festlegung von Linienrouten, siehe Abb. 1, und Frequenzen, d. h. es wird festgelegt, wie viele Linien es gibt, in welcher Reihenfolge die Linien welche Haltestellen bedienen und wie oft sie verkehren.



Die Bestimmung der genauen Abfahrts- und Ankunftszeiten jeder Linie an einer Haltestelle erfolgt i. allg. in dem nachgelagerten Schritt der Fahrplanung. Die Linienplanung unterliegt meist zwei in Konflikt stehenden Zielvorgaben. Zum einen sollen die Kosten für den Betreiber möglichst gering sein, zum anderen wünschen die Passagiere kurze Fahrzeiten und möglichst umsteigefreie Verbindungen. In dem MATHEON-Projekt **Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr** haben wir ein Optimierungsverfahren entwickelt, das beide Ziele berücksichtigt². Die Wertung der Ziele kann jedoch durch einen Gewichtungswert variiert werden, d. h. die Priorität kann von einer Fahrzeitminimierung hin zu einer Kostenminimierung verschoben werden und umgekehrt, vergleiche mit Abb. 3. Eine weitere Eigenschaft des Modells ist die simultane Planung von Linien und Passagierwegen. Schon kleine Änderungen im Liniennetz können die Fahrzeiten und die Umsteigehäufigkeiten mehrerer Verbindungen beeinflussen und somit die Routenwahl der Passagiere verändern³. Gleichzeitig wird auch die Auslastung anderer Linien, die von der Änderung nicht betroffen sind, beeinflusst, siehe Abb. 2. Eine gemeinsame Planung von Linien und Passagierwegen

Abb. 1: Aktuelles Liniennetz von Potsdam.

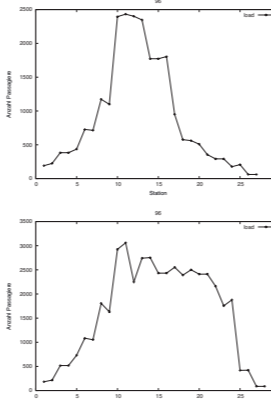


Abb. 2: Auslastung einer Straßenbahnlinie vor (oben) und nach (unten) einer Veränderung des Liniennetzes. Dabei ist diese Linie selbst unverändert geblieben.

Abb. 3: Paretokurve Fahrzeit vs. Kosten. Abhängig von dem Wert eines Parameters (Werte zwischen 0 und 1) werden Kosten und Fahrzeiten (in Minuten) für die Zielfunktion prozentual gewichtet. Ein Wert von 0 bedeutet, nur Fahrzeiten sind wichtig und Kosten unwichtig, ein Wert von 1 bedeutet das Gegenteil.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: In der Linienplanung werden die Routen sowie die Takte der Linien eines Nahverkehrsnetzes festgelegt, d. h., welche Haltestellen werden in welcher Reihenfolge von welcher Linie bedient und wie oft verkehren diese Linien. In diesem Projekt wird ein Modell zur Linienplanung betrachtet, das gleichzeitig alle möglichen Routen der Passagiere berücksichtigt. Dies ermöglicht eine genaue Vorhersage der Fahrzeiten und der Anzahl der Umstiege. Der Liniennplan von Potsdam für 2010 konnte dadurch nicht nur bzgl. der Kosten sondern auch bzgl. der Fahrzeit und der Anzahl der Umstiege verbessert werden.



Abb. 4: Vergleich zweier Liniennetze: Farblich markiert sind die optimierten Buslinien (oben) und Straßenbahnlinien (unten), die vom umgesetzten Plan abweichen.

wird diesem Effekt gerecht. In Zusammenarbeit mit der Verkehr in Potsdam GmbH (ViP) haben wir unser Modell für die Optimierung des Liniennetzes 2010 eingesetzt⁴. ViP ist der Mobilitätsdienstleister der Landeshauptstadt Potsdam. Mit 50 Bussen, 55 Trams und einer Fähre werden 496 Bus-, 126 Tram- und 2 Fährhaltestellen in einem Liniennetz von 389 km Länge verbunden, das jährlich von etwa 27 Millionen Fahrgästen genutzt wird⁵. Die Entwicklung eines neuen Linien- und Taktplans wurde notwendig, da von der Havelbus Verkehrsgesellschaft mbH (HVB) sechs Buslinien übernommen wurden. Der neue Liniennetz sollte keine Mehrkosten verursachen und die Fahrzeiten und Umsteigehäufigkeiten verbessern. Wir gewichteten Fahrzeiten und Kosten so, dass in etwa das Niveau der bisherigen Kosten erreicht wurde, rote Markierung in Abb. 3. Des Weiteren integrierten wir verschiedene planerische Vorgaben in das Modell, die der Liniennetz erfüllen muss, z. B. Mindesttaktung für die Straßenbahn, Mindestbedienhäufigkeiten pro Haltestelle, Mindest- und Höchstlängen für Linien. Für eine detaillierte Auswertung von Passagierwegen, Fahrzeiten und Umsteigehäufigkeiten nutzen wir die an-

erkannte Verkehrssoftware VISUM der PTV AG. Die optimierte Lösung reduziert die gefühlte Reisezeit (eine Gewichtung von Fahrzeiten, Wartezeiten und Gehzeiten) um ca. 6%, die Fahrzeit im Fahrzeug sogar um 10% und die Anzahl der Umstiege um 5%. Gleichzeitig konnten die Kosten um etwa 4% reduziert werden. Der Preis für die Einsparung ist eine Ausdünnung des Straßenbahnnetzes, da Straßenbahnlinien teurer zu betreiben sind als Buslinien. ViP befürchtete jedoch, dass die Reduzierung von Straßenbahnlinien zu einem Nachfragerückgang führt, da die Straßenbahn gegenüber dem Bus das beliebtere Transportmittel ist. Daher setzte ViP eine vom optimierten Liniennetz etwas abweichende Variante um. Tabelle 1 vergleicht die wichtigsten mit VISUM berechneten Kenngrößen des optimierten Liniennetzes mit dem umgesetzten Liniennetz. Mögliche Präferenzen gegenüber verschiedenen Verkehrsmitteln sind in unserem Optimierungsmodell bisher nicht abgedeckt. Die Optimierung dahingehend zu erweitern und darüber hinaus mit einem attraktiven Liniennetz mehr Passagiere für den öffentlichen Nahverkehr zu gewinnen, ist unser nächstes Ziel.

Tab. 1: VISUM Statistik für den optimierten und den umgesetzten Liniennetz.

	optimiert	umgesetzt
mittlere Reisezeit	36 min 3 s	36 min 39 s
mittlere Beförderungszeit	16 min 15 s	17 min 42 s
mittlere Fahrzeit im Fahrzeug	13 min 8 s	14 min 36 s
mittlere Umsteigewartezeit	1 min 30 s	1 min 29 s
mittlere Gehzeit	1 min 38 s	1 min 37 s
mittlere empfundene Reisezeit	26 min	27 min 37 s
Gesamtumsteigehäufigkeit	10595	11141
PF mit 0 Umstiegen	37338	36851
PF mit 1 Umstieg	10088	10503
PF mit 2 Umstiegen	243	306
PF mit mehr als 2 Umstiegen	7	9

¹ R. Borndörfer, M. Grötschel, and U. Jaeger. Planungsprobleme im öffentlichen Verkehr. In M. Grötschel, K. Lucas, and V. Mehrmann, editors, PRODUKTIONSFAKTOR MATHEMATIK – Wie Mathematik Technik und Wirtschaft bewegt, acatech DISKUTIERT, pages 127–153. acatech – Deutsche Akademie der Technikwissenschaften & Springer, 2008. ISBN 978-3-540-89434-6. URL <http://opus.kobv.de/zib/volltexte/2008/1103/>. ZIB Report 08–20

² R. Borndörfer, M. Neumann, and M. E. Pfetsch. Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr. In HEUREKA'08. FGSV Verlag, 2008. URL <http://opus.kobv.de/zib/volltexte/2008/1084/>. ZIB Report 08–04 1

³ R. Borndörfer and M. Neumann. Models for line planning with transfers. ZIB Report 10–11, ZIB, Takustr. 7, 14195 Berlin, 2010. URL <http://opus4.kobv.de/opus4-zib/frontdoor/index/index/docId/1174>

⁴ R. Borndörfer, I. Friedow, M. Karbstein. Optimierung des Liniennetzes 2010 in Potsdam. Der Nahverkehr 4/2012, 34–39.

⁵ www.swp-potsdam.de/swp/de/verkehr/ueber-uns-vip/zahlen_und_fakten-vip/stzahlen_fakten_neu.php

EXAKTE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG

DIE SCIP-SOFTWARE WIRD EXAKT

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Thorsten Koch, Kati Wolter

Kooperation/Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm 1307 „Algorithm Engineering“; H. Milton Stewart School of Industrial and Systems Engineering, Georgia Institute of Technology in Atlanta, USA; Departamento de Ingeniería Industrial, Universidad de Chile in Santiago, Chile

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/exactip

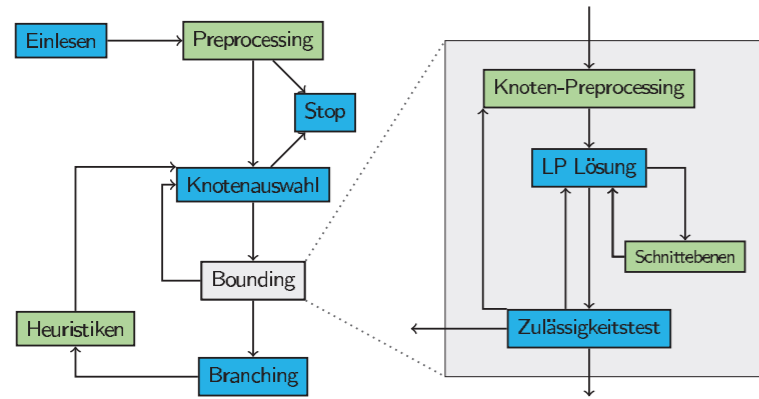


Abb. 1: Ein effizientes Grundverfahren zum Lösen von MIPs ist Branch-und-Bound (blaue Boxen). Erweitert wird es durch zusätzliche MIP-Techniken (grüne Boxen). Für alle Boxen gilt: Durch Fließkommaarithmetik verursachte Rundungsfehler können zu falschen MIP-Lösungen führen. Die Grundkomponenten haben wir bereits sehr gut im Griff.

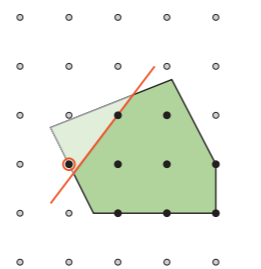


Abb. 2: Selbst leicht unzulässige Nebenbedingungen (rote Ungleichung; erzeugt beim Einlesen, durch Rundungsfehler im Preprocessing oder als falsche Schnittebene) können eine Optimallösung (roter Punkt) abschneiden.

Die ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei denen bestmögliche diskrete Entscheidungen getroffen werden müssen. Zum Beispiel kann eine Pipeline gebaut werden oder nicht, ein Unternehmen kann fünf oder sechs, aber keine 5,2 Arbeiter einsetzen, Buslinien sollen immer in bestimmten Takten verkehren, z. B. alle 10 Minuten. Heutige Marktbedingungen verstärken das Interesse der Industrie an der Optimierung solcher Entscheidungen und Prozesse, insbesondere in den Bereichen Telekommunikation, Logistik, Energie und Verkehr. Derartige Praxisprobleme kann man als gemischt-ganzzahlige Programme (mixed integer programs, MIPs) formulieren. MIPs lassen sich durch das Branch-und-Bound-Verfahren lösen (siehe Abb. 1): Man zerlegt die Probleminstanz sukzessive in kleinere Teilprobleme, bis diese auf einfache Weise zu lösen sind (Branching). Zusätzlich überprüft man, welche Teilprobleme überhaupt noch relevant sind (Bounding). Hierzu berechnet man Schranken für den Zielfunktionswert der besten, noch unbekannt Lösung eines Teilproblems (duale Schranken) und vergleicht sie mit dem Zielfunktionswert der besten bisher bekannten Lösung. Zahlreiche Softwarepakete zum Lösen von MIPs existieren, jedes basiert auf diesem

Grundverfahren. Jedoch wurde bisher in keinem Löser das Problem der Numerik ernsthaft in Angriff genommen. Alle Komponenten der MIP-Löser verwenden Gleitkommaarithmetik. Hierdurch können arithmetische Operationen zwar effizient ausgeführt werden, jedoch treten oft auch Rundungsfehler auf, z. B. bei der Generierung von Schnittebenen (siehe Abb. 2).

Dies kann bewirken, dass berechnete Lösungen nicht optimal oder sogar unzulässig sind. Es ist auch möglich, dass Lösungen gefunden werden, obwohl keine existieren, oder umgekehrt, dass von zulässigen Instanzen behauptet wird, sie seien unzulässig (siehe Abb. 3). Für viele praktische Anwendungen nimmt man diese Fehleranfälligkeit in Kauf – oft genügen die berechneten Ergebnisse auch den jeweiligen Genauigkeitsanforderungen. Die Lage ändert sich jedoch fundamental, wenn reine Zulässigkeitsprobleme betrachtet werden, wenn falsche Antworten rechtliche Folgen haben oder wenn MIPs verwendet werden, um theoretische Fragen zu untersuchen. Wichtige Anwendungen sind z. B. die Chipverifikation und die Vertragsvergabe mittels kombinatorischer Auktionen. Das Ziel unseres Projektes ist ein Framework, das MIP-Instanzen (gegeben durch rationale



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Verfügbare Codes zur Lösung gemischt-ganzzahliger Programme (mixed-integer programs, MIPs) sind auf die schnelle Berechnung von annähernd optimalen Lösungen ausgelegt. Die meisten Nutzer wissen, dass die Antworten nur im Rahmen von Toleranzen verlässlich sind, sie legen in vielen Fällen auf exakte Lösungen keinen besonderen Wert. Die Lage ändert sich fundamental, wenn MIPs verwendet werden, um theoretische Fragen zu untersuchen, wenn Instanzen reine Zulässigkeitsprobleme sind und wenn falsche Antworten rechtliche Konsequenzen haben. Wir erweitern deshalb den Solver **SCIP** zu einem exakten MIP-Löser.

```

Minimize -x#20
Subject to
- x#2 +7 x#1 >= 5
- x#3 +7 x#2 -6 x#1 >= 7
- x#4 +7 x#3 -6 x#2 >= -7
:
- x#19 +7 x#18 -6 x#17 >= 7
- x#20 +7 x#19 -6 x#18 >= -7
3 x#20 -17 x#19 -6 x#18 >= -23
Bounds
0 <= x#1..x#13 <= 10
0 <= x#14..x#20 <= 1000000
General
x#1..x#20
    
```

Abb. 3: Numerisch schwieriges MIP. Antworten eines inexakten MIP-Lösers: (a) mit Standardeinstellungen – MIP hat Lösung, (b) keine Zusatzkomponenten – MIP hat keine Lösung, (c) keine Zusatzkomponenten, x#20 <= 20 – MIP hat Lösung. Welche Schlussfolgerung zieht der Benutzer?

Tab. 1: Performance des exakten Lösers von SCIP. Implementiert ist ein reines Branch-und-Bound-Verfahren. Der wichtigste Teil ist die Berechnung der dualen Schranken (DB). Ein geeigneter Wechsel zwischen verschiedenen DB-Methoden (a)–(d) bringt eine sehr gute Laufzeit im Vergleich zum inexakten **SCIP**.

Daten) exakt lösen kann. Für zulässige Instanzen soll eine beweisbar optimale Lösung berechnet werden, für unzulässige Instanzen ein korrektes Unzulässigkeitszertifikat. Die Basis bildet **SCIP** – eine am ZIB entwickelte Software zur Lösung von Constraint-ganzzahligen Programmen. Wir haben das aktuelle Branch-und-Bound-Verfahren von **SCIP** adaptiert. In der Literatur werden dafür zwei Wege vorgeschlagen. Man kann natürlich alle Operationen auf rationale Arithmetik umstellen und beweisbar korrekte duale Schranken mit einem exakten LP-Löser berechnen. Dieser Ansatz ist aber für praktische Anwendungen ungeeignet, da sich die Rechenzeit in vielen Fällen dramatisch erhöht. Trotzdem hat er einen entscheidenden Vorteil gegenüber dem zweiten, wesentlich schnelleren Ansatz; er kann mit rationalen Daten und MIP-Lösungen umgehen. Der zweite Ansatz benutzt weiterhin Gleitkommaarithmetik (dadurch entstehen Einschränkungen bezüglich der Eingabedaten und möglicher Lösungen) und kontrolliert zusätzlich für wichtige arithmetische Operationen den Rundungsmodus. So kann man erreichen, dass keine falschen Branch-und-Bound-Entscheidungen mehr getroffen werden. Ausgehend von diesen

Ideen haben wir einen neuen exakten Branch-und-Bound-Algorithmus entwickelt, welcher die Vorteile beider Ansätze kombiniert, Schnelligkeit und uneingeschränkte Anwendbarkeit. Der Algorithmus verwendet so viel sichere Fließkommaarithmetik wie möglich und nur so viel rationale Arithmetik wie nötig. Für eine effiziente Umsetzung ist die schnelle Berechnung der sicheren dualen Schranken essenziell. Wir haben unterschiedliche Methoden integriert: Aufruf exakter LP-Löser, exakter Test der LP-Basis auf duale Zulässigkeit, Primal-Bound-Shift¹ und ein neu entwickeltes Verfahren, genannt Project-und-Shift². Dadurch, dass wir für jedes Teilproblem geschickt entscheiden, welche der unterstützten Dual-Bounding-Methoden am besten funktioniert, erzielen wir eine sehr gute Performance, siehe Tab. 1. Auf Instanzen aus Standard-Bibliotheken ist die Laufzeit nur moderat langsamer als mit inexakten Verfahren³.

Aktuell analysieren wir das Verhalten auf numerisch schwierigen Instanzen, z. B. aus der neuen MIPLIB-Bibliothek⁴. Hier produzieren inexakte Löser oft falsche Lösungen. Als nächstes werden zusätzliche MIP-Techniken, insbesondere die Schnittebenengenerierung, untersucht.

SCIP [Branch-und-Bound]	Geometrisches Mittel ⁵			
	gelöst [von 57]	Knoten	Gesamtzeit [Sek.]	DB-Zeit [Sek.]
Inexakte Version	57	18 030	59.4	—
(a) Exakte LP-Lösung	51	18 076	550.7	419.0
(b) Exakte duale Basislösung	51	18 078	461.8	329.8
(c) Primal-Bound-Shift	43	24 994	110.4	13.9
(d) Project-und-Shift	49	18 206	369.3	238.1
Automatische Wahl von (a)–(d)	55	18 226	91.4	18.4

¹ A. Neumaier and O. Shcherbina. **Safe bounds in linear and mixed-integer linear programming**. Mathematical Programming, 99(2): 283–296, 2004

² D. E. Steffy and K. Wolter. **Valid linear programming bounds for exact mixed-integer programming**. Technical Report ZR 11–08, ZIB, 2011. Accepted for publication in INFORMS Journal on Computing

³ W. J. Cook, T. Koch, D. E. Steffy, and K. Wolter. **An exact rational mixed-integer programming solver**. In IPCO 2011, volume 6655 of LNCS, pages 104–116. Springer, 2011

⁴ T. Koch, T. Achterberg, E. Andersen, O. Bastert, T. Berthold, R. E. Bixby, E. Danna, G. Gamrath, A. M. Gleixner, S. Heinz, A. Lodi, H. Mittelmann, T. Ralphs, D. Salvagnin, D. E. Steffy, and K. Wolter. **MIPLIB 2010**. Mathematical Programming Computation, 3(2): 103–163, 2011

⁵ Über 37 Instanzen, die mit allen Versionen innerhalb des Zeitlimits (24 Stunden) gelöst wurden.

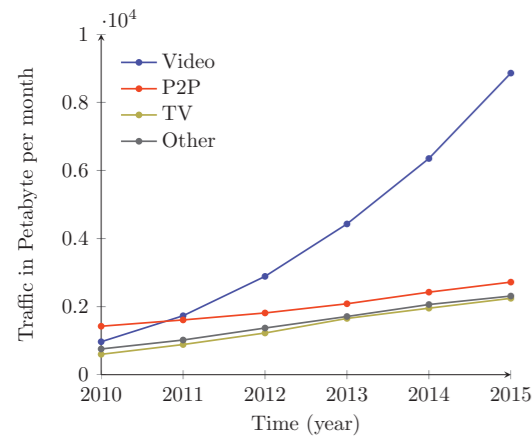
ENERGIESENSIBLE TELEKOMMUNIKATION

MULTILAYER-OPTIMIERUNG ZUM ENERGIEEFFIZIENTEN BETRIEB VON IKT-NETZEN

Bearbeitet von: Christian Raack, Axel Werner

Kooperation/Förderung: BMWi-Initiative IT2Green, Projekt DESI – Durchgängig energiesensible IKT-Produktion; DFG-Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/desi



Moderne Telekommunikationsnetze (IKT-Netze) sind wahre Energiefresser. Für den Betrieb der IKT-Infrastruktur in Deutschland wird bereits heute ein geschätzter Anteil von 8% des gesamten produzierten Stroms aufgewendet.¹ Vor allem im Backbone-Bereich, wo die immer rasanter wachsenden Mengen von Daten gebündelt und über große Strecken weitergeleitet werden müssen, wird sich der Energieverbrauch (proportional zum Verkehrsaufkommen, siehe Abb. 1) in naher Zukunft deutlich erhöhen, wenn die Netzinfrastruktur nicht energieeffizienter organisiert wird. Ein Großteil der Energie im Backbone wird dabei von sogenannten IP-Routern (IP = Internet Protocol) verbraucht. Ein moderner IP-Router kann in jeder Sekunde Informationen im Umfang von mehr als 2000 Milliarden Bits weiterleiten. Dafür müssen Daten, die z. B. als optische Signale aus einer Glasfaser empfangen werden, zunächst in digitale Form zurückübersetzt werden. Aus diesen sogenannten IP-Paketen wird die Zieladresse ausgelesen und über den weiteren Weg der Daten im Netz entschieden. Schließlich wird das Paket wieder in ein optisches Signal umgewandelt und von einem Laser auf die nächste Etappe seiner Reise

geschickt. Alle diese Schritte verbrauchen Energie. Hinzu kommt, dass die an den Bauteilen der Router entstehende Wärme durch energieaufwendige Kühlsysteme abgeführt werden muss. Eines der entscheidenden Potentiale zur Reduzierung des Energieverbrauchs liegt in der Dynamik des Datenverkehrs über der Zeit. Der Energieverbrauch der verwendeten Geräte in der gesamten IKT-Infrastruktur ist derzeit unabhängig vom tatsächlich anfallenden Datenaufkommen! Der auftretende Datenverkehr unterliegt jedoch erheblichen Schwankungen (Tag/Nacht, Wochenende/Wochentag, siehe Abb. 2).

Mit einer intelligenten Organisation der Datenwege und einer (zentralen oder lokalen) Steuerung der Geräteinfrastruktur könnten über weite

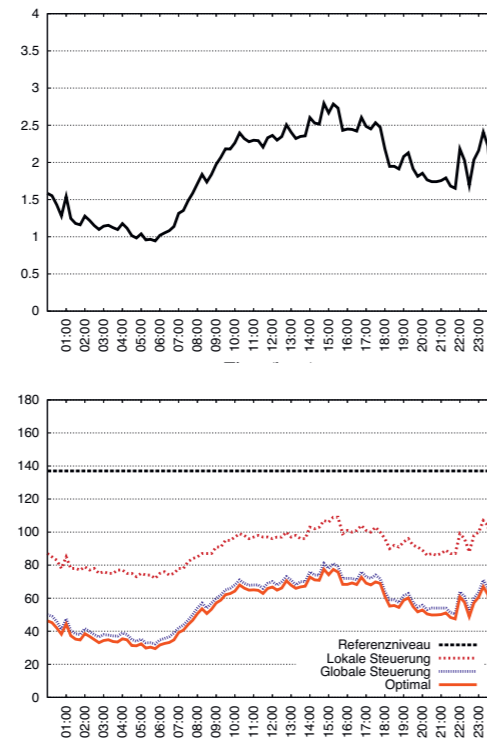


Abb. 1: Cisco Vorhersage: Datenverkehr Mitteleuropa in Petabyte/Monat¹

Abb. 2: Verkehrsaufkommen über einen Tag im Deutschen Forschungsnetz² (skaliert).

Abb. 3: Energieaufnahme bei verschiedenen Strategien zur Änderung des aktiven Netzes: Volle Flexibilität und Globale Steuerung des IP Routings bei adaptivem Abschalten von unbenutzten Linecards ist fast optimal.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Der enorme Anstieg an Datenmengen weltweit verursacht einen stark wachsenden Energieverbrauch moderner Telekommunikationsnetze, deren energiesensible Steuerung damit immer dringlicher wird. Großes Optimierungspotential liegt im zeitlich schwankenden Verkehrsaufkommen, dem sich zukünftige Netze anpassen müssen. Von lokalen Abschaltstrategien bis zur globalen Neukonfiguration der Verkehrsströme gibt es verschiedene Möglichkeiten der energiesparenden Netzoptimierung. Wir untersuchen mathematische Modelle zur Behandlung solcher Optimierungsprobleme und vergleichen sie im Hinblick auf Lösbarkeit und theoretisches Potential.

Abb. 4: Referenznetz der Deutschen Telekom zum Projekt DESI, bestehend aus dem Backbone-Netz (grün) und den angeschlossenen Regio-Netzen (orange).

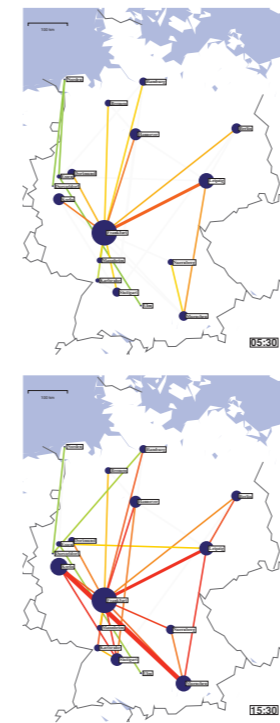
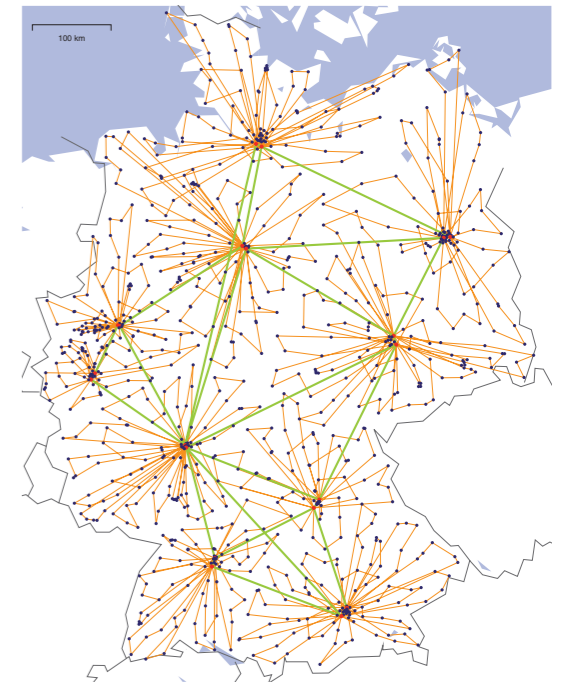


Abb. 5: Anpassung der Netzaktivität an starken Verkehr (oben) und schwachen Verkehr (unten).

Strecken des Tages Teile der Hardware einfach ausgeschaltet werden, was erhebliche Einsparungen im Energieverbrauch nach sich ziehen würde. Wir haben in einer Studie⁴ verschiedene Strategien zur Netzsteuerung in IP-over-WDM-Netzen (WDM = Wavelength Division Multiplexing) unter der Annahme untersucht, dass bei Bedarf Linecards – einzelne Komponenten von IP-Routern – inklusive optischer Laser abgeschaltet werden können. Es stellt sich heraus, dass schon bei voller Flexibilität und globaler Steuerung des IP-Routings fast energieoptimale Kennlinien möglich sind, ohne optische Lichtpfade zu verändern. Aber auch einfache lokale Steuerung und Abschalten unbenutzter Linecards kann bereits Einsparungen ermöglichen, siehe Abb. 3. Im Rahmen des Projekts DESI werden weiterführende Untersuchungen dieser Art zur Energieeffizienz von IKT-Netzen durchgeführt. Dabei erarbeiten wir unter anderem zusammen mit der Deutschen Telekom und dem Gerätehersteller Alcatel Lucent realitätsnahe Modelle, Strategien und Prognosen. Es werden Netze zugrunde gelegt, die neben dem Backbone auch die daran angeschlossenen regionalen Netze umfassen, siehe Abb. 4. Darüberhinaus soll eine genauere Hardwaremodellierung⁵ die in aktuellen und zukünftigen Geräten gegebenen Möglichkeiten zur stufenweisen Abschaltung einzelner Komponenten besser abbilden. Auch die Energieverbräuche weiterer Komponenten wie optischer Verstärker werden berücksichtigt, sowie die Möglichkeit Energie zwischenspeichern und zu Bedarfsspitzenzeiten zu verwenden, was sich positiv auf die Netzstabilität der Stromversorgung auswirkt. Eine der mathematischen Herausforderungen zur Beantwortung solcher Fragestellungen ist die gleichzeitige Optimierung der Energieaufnahme und des Routings über mehrere Netzebenen (Layer) hinweg, hier IP-Layer und



WDM-Layer. Im MATHEON-Projekt B3 haben wir solche Multi-Layer-Netzwerkdesignprobleme näher untersucht und effiziente Methoden zu deren Lösung erarbeitet.⁶ Wir haben verschiedene Ansätze für die Berechnung von energie- und kostenoptimalen Netzwerken, die robust genug sind, um schwankende Verkehrsströme abzubilden, verglichen⁷ und darüber hinaus verschiedene Grade von Flexibilität im Routing im Hinblick auf Berechenbarkeit und theoretisches Potential untersucht.⁸ Das Design von Netzen, die im Betrieb adaptiv gesteuert werden, bei denen also die Verkehrswege dem tatsächlichen Datenaufkommen angepasst werden, erfordert einerseits ein tieferes Verständnis der Entwicklung von Verkehrsströmen und andererseits die Weiterentwicklung von Methoden der robusten Optimierung. Diesen Aufgaben werden wir uns in den nächsten Schritten widmen.

¹ Cisco Visual Networking Index: Forecast and Methodology, www.cisco.com/en/US/solutions/collateral/ns341/ns525/ns537/ns705/ns827/white_paper_c11-481360_ns827_Networking_Solutions_White_Paper.html

² BMWi, <http://www.bmw.de/BMWi/Navigation/Energie/Statistik-und-Prognosen/Energiedaten/energiegewinnung-energieverbrauch.html>

³ DFN, www.dfn.de

⁴ F. Idzikowski, S. Orlowski, C. Raack, H. Woesner, and A. Wolisz. Dynamic routing at different layers in IP-over-WDM networks – maximizing energy savings. Optical Switching and Networking, Special Issue on Green Communications, 8(3): 181–200, 2011. URL <http://opus.kobv.de/zib/volltexte/2010/1230/>

⁵ vgl. W. V. Heddeghem, F. Idzikowski, W. Vereecken, D. Colle, M. Pickavet, and P. Demeester. Power consumption modeling in optical multilayer networks. Photonic Network Communications, 2012. doi: 10.1007/s11107-011-0370-7

⁶ vgl. U. Menne, C. Raack, R. Wessälly, and D. Kharitonov. Optimal degree of optical circuit switching in ip-over-wdm networks. Technical Report 11–50 (accepted for ONDM 2012), Zuse Institute Berlin, Takustr. 7, 14195 Berlin, 2011

⁷ A. M. C. A. Koster, M. Kutschka, and C. Raack. Robust network design: Formulations, valid inequalities, and computations. ZIB Report 11–34 (to appear in Networks), Zuse Institute Berlin, 2011. URL <http://opus4.kobv.de/opus4-zib/frontdoor/index/index/docId/1389>

⁸ M. Poss and C. Raack. Affine recourse for the robust network design problem: between static and dynamic routing. ZIB Report 11-03 (to appear in Networks), Zuse Institute Berlin, 2011. URL http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2011/02/2917.html

CPAIOR 2011

8TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON INTEGRATION OF AI AND OR TECHNIQUES IN CONSTRAINT PROGRAMMING FOR COMBINATORIAL OPTIMIZATION PROBLEMS

Bearbeitet von: Timo Berthold, Ambros M. Gleixner, Stefan Heinz, Thorsten Koch

Kooperation/Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“

Weitere Informationen unter: <http://cpaior2011.zib.de>

Das Konrad-Zuse-Zentrum war vom 23. bis 27. Mai 2011 Gastgeber der internationalen Konferenz CPAIOR 2011. Das interdisziplinäre Treffen bringt Forscher aus den Bereichen Constraint Programming (CP), Artificial Intelligence (AI) und Operations Research (OR) zusammen, um ihre Arbeiten zu neuen Techniken und Anwendungen zu präsentieren, die Methoden und Ideen dieser drei Bereiche benutzen oder verbinden. Darüber hinaus ermöglicht die Konferenz Forschern aus den einzelnen Gebieten, Techniken und Ansätze aus den anderen Gebieten kennenzulernen. Die Konferenzserie blickt bereits auf eine zwölfjährige Geschichte zurück. Nach einer Serie von fünf internationalen Workshops in Ferrara (Italien), Paderborn (Deutschland), Ashford (Großbritannien), Le Croisic (Frankreich), und Montreal (Kanada), wurde CPAIOR im Jahr 2004 als Konferenz etabliert. Mehr als 100 Teilnehmer nahmen an der ersten Ausgabe in Nizza (Frankreich) teil. In den folgenden Jahren wurde die CPAIOR in Prag (Tschechien), Cork (Irland), Brüssel (Belgien), Paris (Frankreich), Pittsburgh (USA) und Bologna (Italien) abgehalten. Weitere Informationen dazu finden sich auf der offiziellen Webseite der Konferenzserie unter www.andrew.cmu.edu/user/vanhoeve/cpaior/.

Die achte CPAIOR, die von einem Team der Abteilung Optimierung – Timo Berthold, Ambros Gleixner, Stefan Heinz und Thorsten Koch – am Konrad-Zuse-Zentrum organisiert wurde, war mit 160 Teilnehmern aus 19 Ländern und vier Kontinenten ein großer Erfolg. Das wissenschaftliche Programm, der Review-Prozess zur Auswahl der Vorträge und die Zusammenstellung des Tagungsbandes wurden von Tobias Achterberg (IBM, Deutschland) und J. Christopher Beck (University of Toronto, Kanada) geleitet.

Die Hauptkonferenz fand vom 25. bis 27. Mai statt und wurde von drei Gastvorträgen umrahmt: Preference Elicitation and Preference Learning in Social Choice von Craig Boutilier (University of Toronto, Kanada), Propagation in Constraints: How One Thing Leads To Another von Ian Gent (St Andrews University, Schottland) und On Bilevel Programming and its Impact in Branching, Cutting and Complexity von Andrea Lodi (DEIS, University of Bologna).

MASTER CLASS

Ein erklärtes Ziel der Konferenzserie ist es, auch Studenten und jungen Forschern Überblick und Einblick in die drei Gebiete Künstliche Intelligenz, Operations Research und Constraint-Programmierung zu geben. Dazu wurde zum Thema „Suche“, ein Thema, das in allen drei Bereichen eine fundamentale Rolle spielt, am Montag, dem 23. Mai, eine sogenannte Master Class veranstaltet. Dabei wurden

- Grundlagen von Such-Algorithmien in Constraint-Programmierung, gemischt-ganzzahliger Optimierung, Satisfiability Testing (SAT) und Künstlicher Intelligenz vermittelt;
- der aktuelle State-of-the-art in den verschiedenen Bereichen vorgeführt;
- Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Gebiete herausgestellt und diskutiert.

Aus jedem Gebiet wurde ein Vortragender eingeladen: John Chinneck (Carleton University, Kanada) mit einem Vortrag zu Search in Mixed-Integer Linear Programming, Gilles Pesant (Polytechnique Montreal, Kanada) zu (Backtrack) Search in Constraint Programming, Marijn Heule (TU Delft, Niederlande) zu Search in SAT und Nathan Sturtevant (University of Denver, USA) mit dem Vortrag The Deployment of Fast A* Search.

Land	Teilnehmer
Australien	6
Belgien	5
Brasilien	1
Dänemark	4
Deutschland	79
Frankreich	10
Großbritannien	3
Irland	2
Italien	5
Japan	2
Kanada	7
Niederlande	3
Norwegen	1
Österreich	3
Schweden	1
Schweiz	9
Tschechien	1
Türkei	2
USA	17
Summe	161



▲ Konferenzlogo



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Konrad-Zuse-Zentrum war Gastgeber der internationalen Konferenz CPAIOR 2011. Das Treffen findet seit 1999 statt und bietet ein interdisziplinäres Forum für Forscher aus den Bereichen Künstliche Intelligenz, Operations Research und Constraint-Programmierung.

WORKSHOPS

Als zweites Ereignis neben der Hauptkonferenz wurden am Dienstag, dem 24. Mai, Workshops zu spezifischen Themen abgehalten, die von Teilnehmern selbst organisiert wurden:

MATHEMATICAL OPTIMIZATION FOR ENERGY NETWORKS

veranstaltet von Armin Fügenschuh, Benjamin Hiller, Jesco Humpola und Thorsten Koch (alle Konrad-Zuse-Zentrum).
<http://cpaior2011.zib.de/workshops/energy/>

HYBRID METHODS FOR NONLINEAR COMBINATORIAL OPTIMIZATION PROBLEMS

veranstaltet von Stefano Gualandi (Università di Pavia, Italien) und Pietro Belotti (Clemson University, USA).
<https://sites.google.com/site/hybridnl2011/>

ISA – INNOVATIVE SCHEDULING AND OTHER APPLICATIONS USING CP-AI-OR

veranstaltet von Armin Wolf (Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik,

FIRST, Berlin, Deutschland) und Petra Hofstedt (Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Deutschland).
www.constraint-programming.de/ISA-CPAIOR-2011/

MATHEMATICAL OPTIMIZATION OF RAILWAY-SYSTEMS

veranstaltet von Ralf Borndörfer (Konrad-Zuse-Zentrum), Holger Flier, Martin Fuchsberger (beide ETH Zürich, Schweiz) und Thomas Schlechte (Konrad-Zuse-Zentrum).
<http://cpaior2011.zib.de/workshops/railway/>

SPONSOREN

Wir bedanken uns bei der Vielzahl interessierter Institute und Unternehmen, die die Organisation der Konferenz finanziell unterstützt haben: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Association for Constraint Programming, SAS, AIMMS, Gurobi Optimization, IBM, FICO, ICS, GAMS, IVU Traffic Technologies AG, MOSEK, NICTA, Open Grid Europe, Jeppesen, The ABB Group, atesio, AMPL, ProCom.

Die Folgekonferenz findet in Nantes, Frankreich, vom 28. Mai bis 1. Juni 2012 statt, siehe www.emn.fr/z-info/cpaior-2012. Alle Vorträge wurden mithilfe der Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme auf Video aufgezeichnet und sind auf der Konferenzwebseite (<http://cpaior2011.zib.de>) und auf der Videoplattform YouTube öffentlich zugänglich.

Gruppenbild aller Teilnehmer der CPAIOR 2011. ▶



PROJEKTE DER ABTEILUNG OPTIMIERUNG

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: www.zib.de/de/optimierung/projekte.html

MATHEON-B3:

Integrierte Planung von Multi-layer Telekommunikationsnetzen

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B3

Mitarbeiter: A. Bley, (-05/2009), M. Grötschel, M. Martens, S. Orlowski (-05/2009), C. Raack, R. Wessälly
Partner: atesio GmbH, DFN-Verein, Nokia Siemens Networks GmbH, IBM/ILOG, RWTH Aachen, Telecommunication Networks Group der TU Berlin, MATHEON-B15

Forschungsförderung:

DFG-Forschungszentrum MATHEON
Inhalt: Realistische Modelle und geeignete Algorithmen zur Netzplanung.

MATHEON-B15:

Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/Matheon-B15

Mitarbeiter: R. Borndörfer, M. Grötschel, M. Karbstein,
Partner: ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, Stadt Potsdam, MATHEON-B3, MATHEON-B20, MATHEON-F4
Forschungsförderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON
Inhalt: Entwicklung mathematischer Optimierungsmethoden zur Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr.

MATHEON-B20:

Optimierung von Gastransportnetzen

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Matheon-B20

Mitarbeiter: T. Berthold, A. Fügenschuh, M. Grötschel, A. Gleixner, S. Heinz, T. Koch, S. Vigerske (HU Berlin), K. Wolter
Partner: MATHEON-B15, MATHEON-C7, FORNE, TU Braunschweig, TU Darmstadt, HU Berlin, Siemens AG, IBM, GAMS Development

Forschungsförderung:

DFG-Forschungszentrum MATHEON
Inhalt: Lösung von Optimierungsproblemen, wie sie im Gastransport und anderen Anwendungen auftreten.

MATHEON-B22:

Umlaufplanung im Schienenverkehr

URL: www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte-lang/matheon-b22

Mitarbeiter: R. Borndörfer, M. Grötschel, O. Heismann

Partner: MATHEON-B15, -B23

Forschungsförderung:

DFG-Forschungszentrum MATHEON
Inhalt: Identifizierung und Analyse typischer Strukturen in Umlaufplanungsproblemen im Schienenverkehr.

EXAKTE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/ExactIP

Mitarbeiter: M. Grötschel, T. Koch, K. Wolter, Daniel E. Steffy

Partner: Georgia Institute of Technology (Atlanta), TU Braunschweig, U de Chile (Santiago de Chile)

Forschungsförderung: DFG-Schwerpunktprogramm 1307 „Algorithm Engineering“

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

IBM/ZIB-KOOPERATION

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/MIP

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

Partner/Forschungsförderung: IBM/ILOG

Inhalt: Forschungsergebnisse zur allgemeinen ganzzahligen Optimierung, die in den Lösern **SCIP** und **CPLEX** eingesetzt werden.

SIEMENS/ZIB-KOOPERATION

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/Siemens

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

Partner: Siemens AG, TU Darmstadt

Forschungsförderung: Siemens AG

Inhalt: Weiterentwicklung von LP- und IP-Lösungssoftware, insbesondere **SCIP** und **SoPlex**, unter besonderer Berücksichtigung von Anforderungen, die bei Siemens entstehen.

ugFRAME

Mitarbeiter: Y. Shinano, T. Koch, S. Heinz

Partner: Chuo University, Japan

Inhalt: Entwicklung einer Bibliothek für massivparalleles MIP-Lösen.

FORNE

Optimierung von Gastransportnetzen

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/energy/forne

Mitarbeiter: Mitarbeiter: A. Fügenschuh, M. Grötschel, B. Hiller, J. Humpola, T. Koch, T. Lehmann, R. Schwarz, J. Schweiger, J. Szabó

Partner: U Hannover, U Duisburg-Essen, HU Berlin, U Erlangen-Nürnberg, TU Braunschweig, WIAS

Forschungsförderung: OpenGridEurope GmbH

Inhalt: Analyse und Optimierung von Gastransportnetzen.

BMW-GASNET

Kapazitätsauswirkungen von Netzerweiterungen und Netzzusammenlegungen

URL: www.zib.de/de/optimierung/energy/projekte/projekte-kurz-archiv-detail/article/n-kap.html

Mitarbeiter: T. Koch, B. Hiller, J. Szabó

Partner: U Erlangen-Nürnberg, U Hannover, U Duisburg-Essen, HU Berlin, TU Braunschweig

Forschungsförderung: Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi)

Inhalt: Verfahren, die es gestatten, in Gasnetzen vorhandene Transportkapazitäten auszunutzen bzw. kostengünstig Engpässe zu beseitigen.

WERKZEUGE ZUR PLANUNG

VON FTTX-NETZEN

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/FTTX

Mitarbeiter: M. Martens (-03/2010), A. Werner

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

Forschungsförderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Inhalt: Entwicklung von innovativen Methoden und Werkzeugen zur modellbasierten Planung von Breitbandzugangnetzen.

MULTIPERIOD NETWORK OPTIMIZATION

Planung beweisbar optimaler Telekommunikationsnetze

URL: www.zib.de/de/optimierung/projekte/projektetails/article/multiperiod-network-optimization.html

Mitarbeiter: M. Grötschel, A. Giovanidis (-08/2011), J. Pulaj

Partner: Zuse-Institut Berlin (ZIB), Warsaw University of Technology, Department of Computer Networks and Switching

Inhalt: Planung beweisbar optimaler Telekommunikationsnetze unter Berücksichtigung unsicherer und über die Zeit veränderlicher Bedarfe.

ROBUKOM

Robuste Kommunikationsnetze

URL: www.robukom.de

Mitarbeiter: F. D'Andreagiovanni, M. Grötschel

Partner: RWTH Aachen University, Lehrstuhl II für Mathematik, TU Berlin, Arbeitsgruppe Kombinatorische Optimierung und Graphenalgorithmen, TU Chemnitz, Arbeitsgruppe Algorithmische und Diskrete Mathematik, TU Chemnitz, Arbeitsgruppe Kommunikationsnetze

Forschungsförderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Inhalt: Im Projekt ROBUKOM werden effiziente Algorithmen zur Lösung von robusten Multilayer-Netzwerkproblemen entwickelt.

PACKETDELAY

Verzögerung von IP-Paketen

URL: www.zib.de/opt-long_projects/Telecom/PackageDelay/index.html

Mitarbeiter: M. Brandt

Partner: Humboldt-Universität zu Berlin (A. Brandt)

Forschungsförderung: Detecon International GmbH

Inhalt: Modellierung der Überlagerung von Paketströmen in Kommunikationsnetzen und der damit verbundenen Verzögerung der Datenübertragung.

BETRIEBSHOFMANAGEMENT

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/TrafficLogistic/VPP

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

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

KOSMOS

URL: www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte-lang/kosmos.html

Mitarbeiter: R. Borndörfer, A. Fügenschuh, T. Klug, T. Schlechte

Partner: Arbeitsgruppe Diskrete Optimierung, TU Darmstadt, Arbeitsgruppe Algorithmische und Diskrete Mathematik, TU Chemnitz, Arbeitsgruppe Mathematische Optimierung, TU Braunschweig, Arbeitsgruppe Verkehrssysteme und -logistik, TU Dortmund, DB Mobility Logistics AG, MATHEON Projekt B24: Scheduling Material Flows in Logistics Networks

Forschungsförderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Inhalt: Fahrtrassenallokation im Schienengüterverkehr.

VR-OPT – Fahrzeugumlaufplanung für die DB Fernverkehr AG

URL: www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte-lang/vehicle-rotation-planning/article/vehicle-rotation-planning.html

Mitarbeiter: R. Borndörfer, M. Reuther, T. Schlechte, S. Weider

Partner/Forschungsförderung: DB Fernverkehr AG

Inhalt: Entwicklung eines voll integrierten Modells und Lösungsverfahrens.

TOLLCONTROLOPT

Optimierung des Mautkontrolldienstes

URL: www.zib.de/de/optimierung/projekte/projektetails/article/tollcontrolopt.html

Mitarbeiter: R. Borndörfer, E. Swarat, G. Sagnol

Partner/Forschungsförderung: Bundesamt für Güterverkehr

Inhalt: Planung der Touren und Dienste der mobilen Kontrollteams für die LKW-Maut auf deutschen Autobahnen.

DESI

Durchgängig energiesensible IKT-Produktion

URL: www.desi-it2green.de

Mitarbeiter: Axel Werner

Partner: Deutsche Telekom AG, Laboratories, Alcatel-Lucent Deutschland AG, Joulex GmbH, PASM Power and Air Condition Solution Solution Management GmbH & Co. KG

SAP

Neue Technologien zur Lösung von SCM-Problemen

URL: www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/scm

Mitarbeiter: T. Koch, G. Gamrath, M. Miltenberger

Partner: SAP Deutschland AG & Co. KG, U Erlangen-Nürnberg

Forschungsförderung: SAP Deutschland AG & Co. KG

Inhalt: Entwicklung neuer Methoden der linearen und ganzzahligen Programmierung zur Lösung von Supply-Chain-Management-Problemen



WISSENSCHAFTLICHE INFORMATIONEN



E-Lectures



Thorsten



Bibliometrie



Museum



kobv



WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

Leitung: Dr. Thorsten Koch

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/si.html



Die Abteilung Wissenschaftliche Information verbindet modernste Informationstechnologie mit Anwendungen für die Wissenschaft. Dabei verstehen wir uns sowohl als Dienstleister wie auch als Motor für die Erforschung und Entwicklung neuer Methoden und Werkzeuge. Die Partner unserer Projekte sind sowohl öffentliche Einrichtungen, wie die wissenschaftlichen Bibliotheken und Museen, als auch Forschungs- und Entwicklungseinrichtungen anderer Hochschulinrichtungen und wissenschaftlicher Institute.

Eine besondere Herausforderung besteht darin, die Ergebnisse der einzelnen Arbeitsgruppen untereinander zu nutzen. Dass Bibliotheken

zunehmend die Rolle eines umfassenden Informationsproviders einnehmen, ist heute selbstverständlich.

Die Techniken und Werkzeuge dazu kommen aus der Webtechnologie und aus dem Informationsmanagement.

Auch die Museen setzen heute auf Technologien aus diesem Bereich. Kaum ein Bereich wie die Informationstechnologie hat eine derartige Dynamik in den letzten Jahren erfahren. Die Verbindungen sind vielfältige und synergetische Effekte der Arbeitsgruppen untereinander vorgezeichnet.

Die Abteilung Wissenschaftliche Information besteht aus den Arbeitsgruppen:

- Informationssysteme
- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin Brandenburg (KOBV)
- Museumsinformation
- Webtechnologie und Multimedia.

Die Arbeitsgruppe Informationssysteme entwickelt Anwendungen, um mathematische Dokumente automatisch zu klassifizieren und mithilfe bibliometrischer Analyseverfahren Ähnlichkeitenuntersuchungen durchzuführen.

Der KOBV ist der zentrale Dienstleister und das Entwicklungszentrum für die Bibliotheken in der Region Berlin-Brandenburg. In prototypischen Anwendungen werden Suchmaschinentechnologien weiterentwickelt und eingesetzt.

Das Kerngeschäft des KOBV ist der Betrieb des Bibliotheksportals, in dem über die Kataloge der beteiligten Einrichtungen gesucht werden kann.

Die Arbeitsgruppe Museumsinformation entwickelt seit vielen Jahren eine auf die Dokumentation und Inventarisierung spezialisierte

Datenbanklösung.

Bei über zehn Kooperationspartnern kommt dabei der Einsatz moderner informationstechnischer Werkzeuge und Methoden zum Tragen.

Die Arbeitsgruppe Webtechnologie und Multimedia betreibt diverse Dienstleistungen und Entwicklungen, um mathematisch relevante Informationen einer größeren Öffentlichkeit zur Verfügung zu stellen.

Neben der technischen und inhaltlichen Betreuung von Webservern gehört dazu auch der Betrieb von Open Access Journalen (Mathematical Programming Computation) und von Konferenzservern, die im wissenschaftlichen Umfeld eingesetzt werden können.

Im Berichtszeitraum wurde der Internetauftritt des 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP) realisiert.

Zusätzlich wird weiterhin die Erfassung von einzelnen Veranstaltungen auf Videomaterial erprobt. Die inhaltliche und strukturelle Weiterverarbeitung dieses Materials steht dabei im Mittelpunkt.



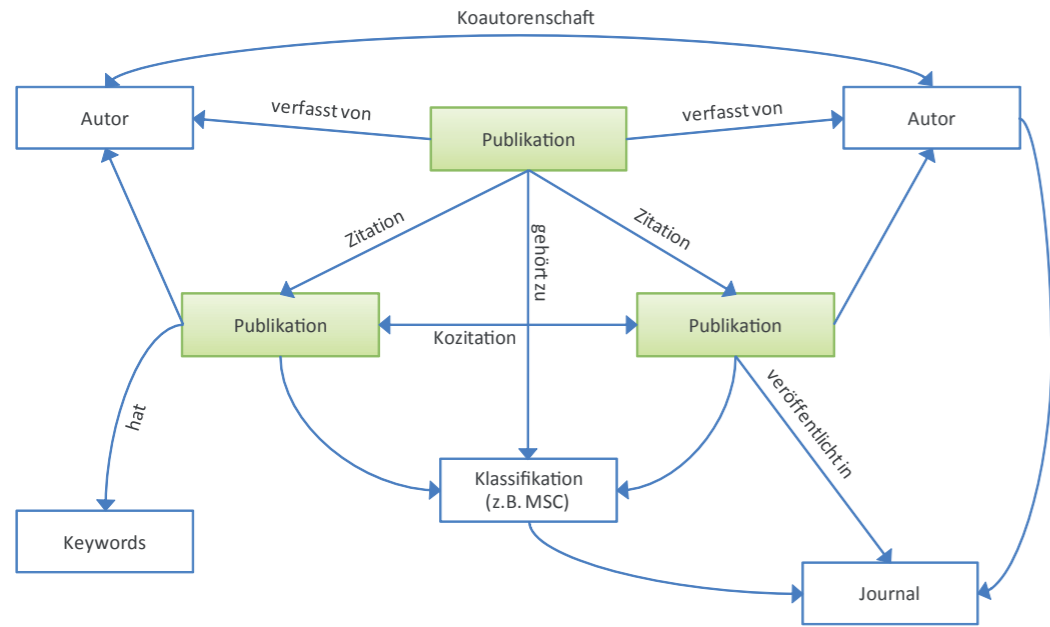
KLASSIFIKATION UND ÄHNLICHKEITSANALYSE MATHEMATISCHER PUBLIKATIONEN

Bearbeitet von: Susanne Gottwald, Thoralf Klein, Thorsten Koch, Gunar Maiwald

Kooperation: Kompetenzzentrum Bibliometrie vom iFQ (Institut für Forschungsinformation und Qualitätssicherung), IWT (Institut für Wissenschafts- und Technikforschung der Universität Bielefeld)

Förderung: Juli 2011 bis Dezember 2012

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/bibliometrie



DER METADATENGRAPH

Die Publikationen und deren Referenzen untereinander lassen sich als Netzwerk abbilden.

Die Knoten im Graphen bilden die Publikationen, deren Autoren sowie die übrigen Metadaten.

Die Kanten des Graphen spiegeln Referenzen zwischen Publikationen und deren Metadaten wieder.

Bisherige Ansätze zur Klassifizierung von Artikeln berücksichtigen nur einen Teil der zur Verfügung stehenden Metadaten (z.B. Worthäufigkeiten, Ko-Zitation). In diesem Projekt sollen weitere Metadaten (wie Titel, Autor, Zeitschrift mit bibliographischen Angaben, Abstract, Referenzen, Autorenschlagworte, Klassifizierung der Zeitschrift, Volltexte etc.) integriert und in unterschiedlichen Ansätzen zur Klassifikation und Analyse von Dokumentähnlichkeiten getestet und kombiniert werden.

Die Grundlage für das weitere Vorgehen bildet der Metadaten-Graph, der aus den Metadaten Mathematik-relevanter Publikationen aus den zur Verfügung gestellten Datenbanken Scopus und Web Of Science gebildet werden muss. Er unterstützt zur Projektlaufzeit die Verfahren zur

Klassifikation und Ähnlichkeitsanalyse. Es lassen sich damit aber auch bibliometrische Fragestellungen untersuchen, z.B.

- Analyse häufiger Ko-Autorenschaft
- Analyse häufiger Ko-Referenz
- Identifikation von Anomalien, die mit hoher Wahrscheinlichkeit auf falsche Daten hindeuten

ZIEL

Es soll eine Anwendung für die Mathematik entwickelt werden, die automatisch Dokumente klassifizieren kann und Ähnlichkeiten der Dokumente untereinander berechnet. Dafür werden Algorithmen entwickelt, die aus den gegebenen Daten und anhand von existierenden Klassifizierungen die mögliche Zuordnung zu einer oder mehreren Klassen dieser Klassifikation

DATEN-STATISTIK

Scopus

1,2 Mio. Publikationen
1,6 Mio. Klassifizierungen der ASJC (All Science Journal Classification)
3 Mio. Keywords
1 Mio. Abstracts

Web Of Science

1,3 Mio. Publikationen
1,3 Mio. Klassifizierungen
5 Mio. Keywords
770.000 Abstracts
20 Mio. Referenzen



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Ziel ist es, einen Proof-of-Concept für die Mathematik zu entwickeln, der basierend auf einem umfassenden Metadaten-Graphen mathematische Dokumente klassifizieren, sie bibliometrisch analysieren und Ähnlichkeiten der Dokumente untereinander bestimmen kann. Als Grundlage stellen die Projektpartner die Datensätze Web Of Science und Scopus mit insgesamt 2,5 Mio. mathematischen Publikationen zur Verfügung.

berechnen. Für die Berechnung der Ähnlichkeit zwischen Publikationen werden die Graphstruktur und ein speziell definiertes Ähnlichkeitsmaß verwendet.

ANFORDERUNGEN

Die entwickelten Verfahren müssen verschiedenen Bedingungen genügen:

1. Es sind Fehler in den Daten zu erwarten. Die Verfahren müssen also robust gegen solche Störungen sein.
2. Die Anwendung muss auf großen Datenmengen und entsprechend großen Metadaten-Graphen möglich sein.
3. Der Erfolg der entwickelten Verfahren muss sich durch eine abschließende Evaluation mit Testdaten bestätigen lassen.

KLASSIFIKATION

In den bereitgestellten Daten sind bereits Klassifikationen für komplette Journale enthalten, nicht aber für individuelle Publikationen. Im Projekt sollen Methoden zur Klassifikation auf Ebene individueller Publikationen entwickelt werden. Ausgangspunkt sind existierende Methoden aus dem Machine-Learning. Diese „erlernen“ auf Basis der Journalbasierten Trainingsdaten eine Klassifikation und verallgemeinern diese auf individuelle, unbekannte Dokumente. Ziel ist ein Verfahren, das ohne Volltext, jedoch zusätzliche unter Ausnutzung des Metadaten-Graphen eine Genauigkeit erreicht, die an die Ergebnisse eines Verfahrens mit Volltext heranreicht.

INTERDISZIPLINARITÄT

Um die entwickelten Verfahren auf andere Fachgebiete zu verallgemeinern, soll mit der Urologie ein begrenztes Fachgebiet jenseits der Mathematik als Fallstudie exemplarisch unter-

sucht und der Frage nachgegangen werden, inwieweit eine automatische Integration von Thesaurus-Einträgen aus einer öffentlich zugänglichen Fachdatenbank (hier PubMed und der Medical Subject Headings MeSH) in die am iFQ geführten Bestände möglich ist. Die daraus resultierenden Erfahrungen sollen als zusätzlicher Input in die Entwicklungen beim ZIB zurückgespeist werden.

ISMP 2012 IN BERLIN

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Wolfgang Dalitz, Julia Goltz, Klaus-Dietrich Engel, Uwe Pöhle, Winfried Neun

Kooperation: TU Berlin, Mathematical Optimization Society, TUBS

Weitere Informationen unter: www.ismp2012.org



Das International Symposium on Mathematical Programming (ISMP)¹ findet im August 2012 in Berlin (an der TU) statt. Die Abteilung Wissenschaftliche Information wurde damit beauftragt, eine Webpräsentation der Tagung technisch zu realisieren, die insbesondere auch Werkzeuge zur Organisation bereitstellt. Den Auftrag für das graphische Design (einheitlich für Webseite, Plakate und Flyer) hatte die TU an externe Fachleute vergeben.

DAS RAD NEU ERFINDEN

Tagungen und Konferenzen sind von den (technischen) Anforderungen an die Organisation eigentlich recht klar. Es gibt eine Anmelde- und Bezahlkomponente, Möglichkeiten, einen Vortrag einzureichen (der natürlich von autorisierten Personen begutachtet werden muss), darauf aufbauend ein Programm und einen Raumplan, allgemeine Informationen zu Unterkünften und ggf. zu Sehenswürdigkeiten der Stadt. Flankiert wird das alles von passiven (Webserver, iCal) wie aktiven Internetdiensten (RSS-Feeds, Mailinglisten).

Zwar gibt es auch im Open-Source-Bereich viele Konferenzsysteme, die sich für eine Veranstaltung dieser Größenordnung (ca. 2.000 Teilnehmer werden erwartet) anbieten, allerdings weichen die Vorstellungen und Wünsche der Organisatoren meist deutlich von den Möglichkeiten dieser (Standard-)Werkzeuge ab. Das beginnt mit dem Layout und dem Farbmanagement der Seiten, geht über den Workflow der Anmeldung und die Einreichung der Abstracts und endet bei den Schnittstellen zu externen Dienstleistern, die z.B. für die sensiblen Kreditkartendaten zum Bezahlen der Tagungsgebühren zuständig sein sollen.

JOOMLA ALS BASISSYSTEM

Wir haben uns nach Evaluation bekannter Konferenzmanagementsysteme dazu entschlossen, das Content-Management-System (CMS) Joomla einzusetzen und darauf aufbauend Erweiterungen zu entwickeln, die für die Aufgaben dieser Konferenz passend sind.

DIE KONFERENZ IN KÜRZE

- 2.000 Teilnehmer
- 1.750 Talks
- 600 Sessions
- aufgeteilt in 24 Clustern



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP) ist mit erwarteten 2.000 Teilnehmern eine der großen Konferenzen der Mathematik. Die Arbeitsgruppe Webtechnologie und Multimedia hat auf Basis des Content-Management-Systems Joomla für die Konferenzorganisation eine Webpräsentation erstellt. Schnittstellen zu externen Dienstleistern wurden dabei ebenso realisiert wie spezielle Wünsche der Organisatoren nach einem einfachen Sessionmanagement und nach einem optimierten Veranstaltungskalender.

LAMP STEHT FÜR:

- Linux
- Apache
- MySQL
- PHP

OPTIMALE TERMINPLANUNG

Joomla ist eines der bekannteren CMS, das auf einer gängigen LAMP-Infrastruktur aufsetzt. Ein Vorteil der offenen Architektur ist es, dass Werkzeuge benutzt werden können, die einen Zugriff auf die bekannten Schnittstellen erlauben, wie zum Beispiel auf die verwendete MySQL-Datenbank. Diese nutzen wir zum Auslesen von (bei der Anmeldung abgefragten) Wünschen der Teilnehmer zum Besuch einzelner fachlicher Schwerpunkte. Ein Programm der Abteilung Optimierung erstellt daraus dann einen Tagungsplan samt Raumzuordnung. Damit soll vielen Teilnehmern der Besuch von vielen Veranstaltungen ermöglicht werden.

ORGANISATION IST ALLES

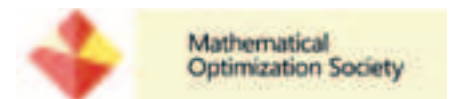
Zu dem meist unterschätzten Bereich der Konferenzorganisation gehören die Aufgaben, die ein normaler Tagungsteilnehmer in der Regel nicht sieht. Dazu gehören

- verantwortliche Cluster- und Sessionchairs zu benennen und ihnen Funktionen zur Verwaltung ihrer Chairs/Session zur Verfügung zu stellen
- Spezialvorträge und Plenary Talks müssen berücksichtigt werden; sie unterliegen nicht dem Refereeprozess der anderen Talks
- Administrationswerkzeuge entwickeln
- Statistiken über die Nutzung des Systems erzeugen
- ein Benachrichtigungssystem für verschiedene Nutzergruppen bereitstellen
- jederzeit (in der Regel per E-Mail) ansprechbar für Probleme zu sein.

FAZIT

Insgesamt ist Joomla ein guter Kompromiss zwischen schon vorhandenen und für unsere Zwecke nützlichen Komponenten sowie der Möglichkeit, individuelle Erweiterungen zu entwickeln.

Aufgrund des zu Recht bestehenden Anspruchs, eine Tagung auch individuell zu gestalten, muss man sich im Vorfeld klar darüber sein, dass das nur mit einigem Aufwand zu realisieren ist. Andersherum sind die jetzt von uns realisierten Lösungen nur bedingt für die nächste Konferenzorganisation einsetzbar. Die im Vorfeld der Konferenz evaluierten Konferenzmanagementsysteme entwickeln sich weiter und sind auch flexibel genug, die Standardanforderungen an eine Konferenzorganisation zu unterstützen. Es lohnt sich allemal, zur Unterstützung einer neuen Konferenz, diese Weiterentwicklungen zu begutachten.



KOOPERATIVER BIBLIOTHEKSVERBUND BERLIN-BRANDENBURG (KOBV)

Bearbeitet von: Steffi Conrad-Rempel, Hildegard Franck, Julia Goltz (ab 06/11), Julian Heise (bis 09/11), Thorsten Koch, Renate Kraft, Monika Lill, Stefan Lohrum, Angela Pohl (bis 04/11), Jannis Polojannis (ab 09/11), Wolfgang Peters-Kottig, Björn Kirchoff (ab 11/11), Beate Rusch, Katja Schmidt, Jens Schwidder, Sascha Szott, Doreen Thiede, Signe Weihe (ab 10/2011), Yu Weng (bis 10/11) und Melanie Herzog (ab 09/11), Uta Kaminsky, Anja Kammel (FAK-Geschäftsstelle)¹.

Kooperation: Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg

Förderung: Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin;

Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg

Weitere Informationen unter: www.kobv.de



HOSTING-DIENSTLEISTUNGEN FÜR BIBLIOTHEKEN

Bibliotheksoftware gilt in Hochschulrechenzentren oftmals eher als exotisch und wird entsprechend stiefmütterlich gepflegt. Aber auch die EDV-Abteilungen in den Bibliotheken kommen mit der zunehmenden Komplexität der Applikationen durch Zusatzmodule und Schnittstellen sowie wachsende Anforderungen an Hardware und Verfügbarkeit an ihre Grenzen. Hier bietet sich der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg mit seinen ASP-Diensten (Application Service Providing) als spezialisierter Partner im ZIB an.

Oftmals sind es KOBV-Mitgliedsbibliotheken, die mit dem Wunsch nach einem neuen ASP-Dienst an die KOBV-Zentrale herantreten. Ein Beispiel dafür ist die kommerzielle Recherchelösung Primo, für die gleich bei der Lizenzierung durch die Berliner Universitäten ein Hosting-Angebot am ZIB mitgedacht worden ist. Eine andere Vorgeschichte hat der ASP-Dienst für die Linking-Software SFX. Diese schlanke, durch eine Wissensdatenbank unterstützte Software bot sich für einen Hosting-Service

dadurch an, dass sie von der KOBV-Zentrale in eigenen Internetangeboten genutzt wird und in einer späteren Phase dann auch Bibliotheken (als weiteren Mandanten) angeboten werden konnte.

Im Portfolio des KOBV findet sich kommerzielle, proprietäre Software ebenso wie Open Source Software, die zum Teil selbst entwickelt wird. Für Letztere steht die Repositoriumssoftware OPUS 4, bei der Entwicklung und Hosting Hand in Hand gehen.

Der ASP-Dienst umfasst in der Regel zunächst die Bereitstellung der technischen Plattform und der Netzinfrastruktur (inkl. Vorkehrungen zur Datensicherheit). Die KOBV-Zentrale übernimmt die anwendungstechnische Betreuung. Dazu gehören die Installation, der Betrieb und die Betreuung der Datenbankplattform (inkl. Sicherungen), die Installation der eigentlichen Software und Software-Updates (inkl. Datenbank-Updates, Übernahme aller Daten und Konfigurationen sowie der Anpassungen). Je nach Anwendung werden eine Grundkonfiguration eingerichtet und Schnittstellen bereitgestellt.

HOSTING-DIENSTE IM ÜBERBLICK:

IT as a Service

- Virtuelle Server

Software as a Service

Kommerzielle Software

- Portalsoftware (MetaLib)
- Linking-Software (SFX)
- Primo, Resource Discovery
- SISIS –Sunrise über den Bibliotheksverbund Bayern

Eigenentwicklungen

- ALBERT Library Search-Engine
- OPUS und Archivierungsdienste

Plattform as a Service

- Virtuelle Verbundkataloge
- Online Fernleihe
- B3Kat-Katalogisierungsdatenbank

Hostingpartner in Auswahl

Freie Universität Berlin, Technische Universität Berlin, Humboldt Universität zu Berlin, Universität der Künste, Fachhochschule Potsdam, Technische Fachhochschule Wildau, Zentral- und Landesbibliothek Berlin, Deutsches Geoforschungs-Zentrum, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Universität Bayreuth, Universität Mannheim, Universität Bielefeld u. v. m.



Der KOBV bietet den Zugang zu den Katalogen und Benutzerdiensten zahlreicher Bibliotheken in Berlin und Brandenburg. Für ihre Bibliotheken wirkt die KOBV-Zentrale am Zuse-Institut als Dienstleistungs- und Entwicklungszentrum. KOBV-Mitgliedsbibliotheken sind alle 22 Universitäts- und Hochschulbibliotheken aus der Region, eine Bibliothek privater Hochschulen, beide Landesbibliotheken, 9 Bibliotheken der Obersten Bundesbehörden und 45 Forschungs- und Spezialbibliotheken. Dazu kommen als Partner der Verbund Öffentlicher Bibliotheken Berlins und der Verbund der Öffentlichen Bibliotheken des Landes Brandenburg.

Das Zusammenspiel zwischen dem ZIB, der KOBV-Zentrale und den Bibliotheken folgt in allen Hosting-Angeboten demselben Muster. Das ZIB zeichnet für die Hardware- und Netzinfrastruktur verantwortlich, während sich die KOBV-Zentrale um die eigentliche Pflege der Anwendung und die Kommunikation mit den Partnerbibliotheken kümmert. Die Bibliotheken übernehmen die Konfigurationsarbeiten und Layout-Anpassungen gemäß ihren eigenen Anforderungen. Je nachdem wie sehr sich die jeweilige Software für eine konsortiale Nutzung eignet, kommt der KOBV-Zentrale eine mehr oder weniger starke koordinierende Rolle zu. Dann gilt es, organisatorische Absprachen zu finden und „Best Practices“ festzulegen, um eine softwareseitig gegebenenfalls fehlende Mandantenfähigkeit zu ersetzen.

Die Zusammenarbeit der Bibliotheken im Rahmen konsortial genutzter Software wie Primo wird von den Partnerbibliotheken als bereichernd empfunden. Der KOBV bemüht sich, den Austausch der Bibliotheken untereinander zu fördern und Wünsche und Fehlermeldungen geprüft und gebündelt an die Hersteller oder die Entwickler im Hause weiterzugeben. Diese Abstimmungen sind aus Bibliothekssicht neben den Einsparungen an Hardware und in der Systempflege ein weiteres Argument für das Auslagern von Software.

Kleinere Einrichtungen allerdings stellen sich in der Regel noch deutlich weitergehende Dienstleistungen vor. Hier werden vorkonfigurierte Anwendungen gewünscht, die auch die bibliothekarischen Anpassungen und Konfigurationen einschließen. Entsprechend personalintensiv sind diese Dienste. Als vorbildlich gilt hier beispielsweise der SISIS-ASP-Dienst, den

der KOBV durch seine strategische Partnerschaft mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) anbieten kann. Mit der SISIS-Software wird ein Herzstück jeder Bibliothek, ein System, das sämtliche bibliothekarische Geschäftsgänge inklusive der OPAC-Funktionalität abbildet, außer Haus gegeben.

Entsprechend hohe Anforderungen stellen die Bibliotheken an die Verfügbarkeit der Anwendungen. Das erfordert für den KOBV im Servicebereich eine Abkehr von einer projektorientierten Arbeitsweise. Die Umsetzung der Anforderungen resultiert unter anderem im Monitoring der Anwendungen durch interne und externe Dienste, dem Führen eines Notfallhandbuchs und in der Etablierung einer telefonischen Hotline. Auch der alljährliche Wartungstag des ZIB wird in diesen Zusammenhängen zum Problem. Für kritische Anwendungen wie die Discovery-Systeme Primo und ALBERT Library Search Engine, die als erster Sucheinstieg für Benutzer die bibliothekarische Visitenkarte im Internet bilden, denken wir hier über externe Failover-Systeme nach. Höhere Verfügbarkeit zu bezahlbaren Konditionen anzubieten, das wird eine der Herausforderungen für die Zukunft sein.

Perspektivisch bietet es sich an, die steigende Zahl von Hosting-Dienstleistungen auf einer gemeinsamen Plattform stärker untereinander zu verzahnen und für die Administration einheitlich zur Verfügung zu stellen. Hier gilt es, sich an den kommerziellen Cloud-Anbietern zu orientieren, die mit ihrer Terminologie „IT as a Service, Software as a Service, Plattform as a Service“, mit anderen Worten das beschreiben, was Bibliotheken im KOBV heute bereits erleben.

¹ Der Verbundzentrale des KOBV ist die Geschäftsstelle des Friedrich-Althoff-Konsortiums e.V. angegliedert. Im Friedrich-Althoff-Konsortium haben sich wissenschaftliche Einrichtungen der Länder Berlin und Brandenburg zusammengeschlossen, um unter anderem durch den gemeinschaftlichen Erwerb

PROJEKTE DER ABTEILUNG WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

ISMP 2012

URL: www.ismp2012.org

Mitarbeiter: T. Koch, W. Dalitz, K.-D. Engel, U. Pöhle, J. Goltz, W. Neun

Inhalt: Der Webaufttritt für das International Symposium on Mathematical Programming (ISMP) wird am ZIB entwickelt. Veranstaltungsort ist die TU Berlin.

Computeralgebra (REDUCE)

URL: www.reduce-algebra.com

Mitarbeiter: W. Neun

Inhalt: REDUCE ist ein interaktives Computeralgebrasystem, das am ZIB seit vielen Jahren mitentwickelt und auf vielen Systemen portiert wird.

Museumsprojekt

URL: <http://www.zib.de/de/si/museums-software.html>

Mitarbeiter: H. Eggers, B. Fichtl, B. Jahn, C. Saro

Inhalt: Das Projekt „Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für Museen“ bietet EDV-technische Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen an und unterstützt die Vermittlung und Verbreitung international anerkannter Standards in der deutschen Museumswelt.

Klassifikation und Ähnlichkeitsanalyse mathematischer Publikationen

URL: www.zib.de/jb2011/bibliometrie

Mitarbeiter: S. Gottwald, T. Koch, T. Klein, G. Maiwald

Inhalt: Das Ziel ist es, einen Proof-of-Concept für die Mathematik zu entwickeln, der basierend auf einem umfassenden Metadatengraphen mathematische Dokumente klassifizieren, sie bibliometrisch analysieren und Ähnlichkeiten der Dokumente untereinander bestimmen kann.

OPUS 4

URL: <http://opus4.kobv.de>

Mitarbeiter: S. Gottwald, J. Heise, T. Klein, G. Maiwald, J. Schwidder,

B. Rusch, S. Szott, D. Thiede, S. Weihe

Inhalt: Das am ZIB entwickelte OPUS 4-System ermöglicht den Bibliotheken und Hochschulen die Verwaltung ihrer Publikationen. Es ist als Open Source-Projekt realisiert und bietet Such- und Veröffentlichungsfunktionen.

E-Lecture

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

Mitarbeiter: S. Putzke, W. Dalitz

Inhalt: Am ZIB stattfindende Veranstaltungen werden exemplarisch per Video aufgezeichnet und zur Nachnutzung ins Netz gestellt.

MPC

elektronisches Journal 'Mathematical Programming Computation' (MPC)

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

Mitarbeiter: T. Koch, W. Dalitz, S. Gottwald, T. Klein

Inhalt: Das Journal MPC zielt auf einen vollständigen elektronischen Workflow (Einreichung, Reviewing, Revision und Publishing) ab.

Fachgruppe IuK der DMV/ÖMG

URL: www.zib.de/iuk-DMV

Mitarbeiter: U. Pöhle, W. Dalitz

Inhalt: Web-Server der Fachgruppe „Information und Kommunikation“ der Deutschen Mathematiker-Vereinigung/Österreichischen Mathematischen Gesellschaft(DMV/ÖMG). ZIB-Mitarbeiter sind seit vielen Jahren im Sprechergremium der Fachgruppe.

Math-Net

URL: www.math-net.org

Mitarbeiter: W. Dalitz, M. Grötschel

Inhalt: Koordinierungsstelle der Aktivitäten im IuK-Bereich der Mathematik in Deutschland.

Server der International Mathematical Union (IMU)

URL: www.mathunion.org

Mitarbeiter: W. Dalitz, M. Grötschel

Inhalt: Das ZIB hat seit den 1990er Jahren die technische und organisatorische Infrastruktur für die IMU konzipiert und aufgebaut. Im Herbst 2011 sind die Geschäftsstelle und die technischen Services zum WIAS gegangen.

PROJEKTE DES KOBV

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte

Aufbau der Gemeinsamen Verbunddatenbank B3Kat von KOBV und Bibliotheksverbund Bayern (mit dem Bibliotheksverbund Bayern)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2008–2011

Mitarbeiter: H. Franck, M. Lill, W. Peters-Kottig, B. Rusch, K. Schmidt, **Inhalt:** Migration von 16 Katalogen der Universitäts- und Hochschulbibliotheken in eine neue gemeinsame Katalogisierungs-umgebung.

LAUFENDE PROJEKTE

Automatische Fehleranalyse in Bibliothekskatalogen (Mable+)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2010–2012

Mitarbeiter: J. Goltz, J. Schwidder **Inhalt:** Konzeption und prototypische Entwicklung eines Baukastensystems für die automatisierte Analyse und Bearbeitung von bibliographischen Metadaten.

Automatische Konvertierung von PDFs in alternative E-Publishing-Formate (mit dem Bibliotheksverbund Bayern)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2010–2012

Mitarbeiter: J. Goltz, J. Schwidder **Inhalt:** Problemanalyse für die Konvertierung von PDFs für mobile Anwendungen.

Contentvisualisierung für Bibliothekskataloge (mit dem Bibliotheksverbund Bayern)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2010–2012

Mitarbeiter: J. Goltz, J. Schwidder **Inhalt:** Konzeptstudie zum Einsatz von Visualisierungsmöglichkeiten in Bibliothekskatalogen.

Entwicklung von Workflowkomponenten für die Langzeitarchivierung von Forschungsdaten in den Geowissenschaften (EWIG)

URL: <http://ewig.gfz-potsdam.de>, www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2011–2014

Mitarbeiter: W. Peters-Kottig **Inhalt:** Identifizierung und Schließen von Lücken in den Ingestworkflows zur Überführung von Forschungsdaten in digitale Langzeitarchive.

Gemeinsame Normdatei für Aleph (mit Hochschulbibliothekszentrum NRW, Bibliotheksverbund Bayern, Österreichischer Bibliothekenverbund und Service GmbH, Ex Libris GmbH)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte, 2010-2012

Mitarbeiter: B. Rusch **Inhalt:** Konzeption und Implementierung der Software zur Unterstützung der neuen nationalen Normdatei für Personen, Körperschaften und Sachschlagwörter in den ALEPH-Katalogisierungsdatenbanken

Dienstleistungen für Benutzer aus Bildung und Wissenschaft

KOBV-Bibliothekenführer

bibinfo.kobv.de

KOBV-Portal mit Online-Fernleihe

digibib.kobv.de

Virtueller Verbundkatalog (Film, Judaica, Noten)

digibib.kobv.de

Dienstleistungen für Bibliotheken

Automatisierte Fernleihe

www.kobv.de/infos_fuer_bibliotheken/services_fuer_bibliotheken/fernleihe/

ASP-Dienst OPUS- und Archivierungsdienste

www.kobv.de/bib_opus_archvierung.html

ASP-Dienst Portale und SFX

www.kobv.de/bib_konsortial.html

ASP-Dienst Primo

www.kobv.de/bib_primo.html

ASP-Dienst Verde

www.kobv.de/bib_verde.html

Hosting für lokale Applikationen

www.kobv.de/bib_hosting_software.html

KOBV-Index

www.kobv.de/kobvindex.html

ALBERT – Library Search Engine

albert.kobv.de



PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME



1

2

3

4

M

register T
accept
(k, v) msg

register TP

TPs

k items
v replicas

c

pid

x

PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

Leitung: Prof. Dr. Alexander Reinefeld, Dr. Florian Schintke
Weitere Informationen unter: www.zib.de/PVS

MISSION

Parallele und verteilte Systeme sind in der Informatik zum „Mainstream“ geworden. Mit dem zunehmenden Einsatz von Multi- und Many-Core-Prozessoren findet jetzt – nach mehr als einem halben Jahrhundert sequentieller Programmierung – ein Paradigmenwechsel statt. Waren parallele Algorithmen früher nur für Supercomputer und teure Server von Bedeutung, so werden sie heute sogar schon in Smartphones eingesetzt, weil auch hier zunehmend Multi-Core-Prozessoren immer komplexere Berechnungen durchführen. Unsere langjährige Erfahrung in der Entwicklung hochparalleler Algorithmen trifft dadurch auf großes Interesse in Wissenschaft und Wirtschaft.

Darüber hinaus beschäftigen wir uns mit der Entwicklung skalierbarer, fehlertoleranter, verteilter Algorithmen für Cloud-Systeme. Ein Forschungsschwerpunkt liegt im Management sehr großer verteilter Datenmengen. Grid- und Cloud-Computing, Web-Services und Peer-to-Peer-Protokolle haben aus dem Internet eine interaktive Plattform mit vielfältigen Dienstleistungen und enormer wirtschaftlicher Bedeutung gemacht. Unsere Forschung dient dem besseren Verständnis der theoretischen Grundlagen und praktischen Implementation adaptiver, skalierbarer Dienste.

STRUKTUR

Drei Arbeitsgruppen decken das gesamte Spektrum von den verteilten bis zu parallelen Algorithmen ab:

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

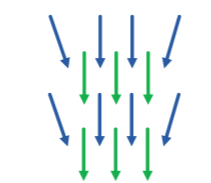
VERTEILTES DATENMANAGEMENT

Diese Arbeitsgruppe entwickelt Methoden zum Management global verteilter Daten. Replikation und Synchronisation, Konsistenz und Fehlertoleranz spannen die zentralen Problemfelder unserer Forschung in diesem Gebiet auf.

Eines unserer Schlüsselprojekte ist das objektbasierte Cloud-Dateisystem **XtreemFS**. Es verwaltet die Metadaten separat von den Objektdaten. Replikation und Striping ermöglichen einen schnellen, ausfallsicheren Datenzugriff im Internet. Trotz dieser innovativen Eigenschaften, die bislang kaum ein anderes verteiltes Dateisystem aufweist, ist XtreemFS kein reines Forschungsprojekt, sondern wurde im Jahr 2011 bereits im Produktionsbetrieb eingesetzt, z.B. als Daten-Backend im Projekt „First we take Berlin...“, das mit dem schnellen Zugriff auf Filmsequenzen besonders hohe Anforderungen stellt, oder im BMBF-Projekt Mos-Grid. Die Entwicklung der Software wurde bzw. wird ganz wesentlich von der Europäischen Union mit den Projekten XtreemOS (2006–10) und CONTRAIL (2010–13) finanziell gefördert.

Scalaris ist unser zweites, international bekanntes Schlüsselprojekt. Scalaris ist der weltweit erste verteilte Key/Value-Speicher, der Transaktionen auf replizierten Daten in einem strukturierten Overlay-Netzwerk realisiert. Erst kürzlich hat der bekannte Cloud-Provider Amazon, der für seine Kunden bislang nur schwache Datenkonsistenz anbot, auch ähnliche Methoden wie Scalaris zur Gewährleistung strenger Konsistenz implementiert.

Für Grid-Anwendungen haben wir die Softwarepakete **Stellaris** und **GNDMS** entwickelt. Für die schnelle Suche und den Zugriff auf teilweise strukturierte Daten in der Astronomie



nutzt Stellaris RDF-Schemata, die als Subjekt-Prädikat-Objekt-Tripel verknüpft sind. GNDMS unterstützt Co-Scheduling von Datenübertragungen und Rechenjobs, die automatisierte Verwaltung von Zwischendaten im Grid Life-Cycle-Management, sowie eine flexible Vorverarbeitungsschnittstelle für den effizienten Zugriff auf Teildaten aus Archivsystemen.

SKALIERBARE ALGORITHMEN

In dieser Arbeitsgruppe konzentriert sich die Forschung auf die Aspekte Skalierbarkeit, Zuverlässigkeit und Effizienz. Unter Skalierbarkeit verstehen wir, dass einer wachsenden Anfragelast durch das Hinzufügen weiterer Prozessoren begegnet werden kann. Zuverlässig ist ein Algorithmus, wenn einzelne Rechnerausfälle den Fortschritt der Berechnung nur peripher beeinflussen, und effizient ist er, wenn er unabhängig von der Eingabe stets sehr schnell ein Ergebnis liefert.

Diese drei Eigenschaften lassen sich mit **Peer-to-Peer-Algorithmen** realisieren. Hier wird der Algorithmus nicht funktional, sondern fraktal parallel auf gleichberechtigten Komponenten ausgeführt. Wir haben schnelle Routingverfahren für strukturierte Overlay-Netzwerke entwickelt, die in logarithmischer Zeit das gewünschte Ziel erreichen. Diese Verfahren, die teilweise patentiert sind, bilden die Basis für die oben vorgestellte Scalaris-Software.

Als Highlight der letzten beiden Jahre haben wir einen neuen Algorithmus zur Berechnung kürzester Pfade auf massiv parallelen Rechnern entwickelt. Basierend auf dem MapReduce-Programmiermodell konnten wir erstmals sehr umfangreiche Lösungsräume vollständig

durchsuchen. Mit der „out-of-core“-Variante desselben Verfahrens haben wir leistungsfähige Heuristiken berechnet. Diese Speichertabellen sind – nach unserer Kenntnis – die umfangreichsten weltweit. Mit ihrer Hilfe konnten wir auf 7.549 Prozessoren in wenigen Minuten kürzeste-Pfad-Probleme berechnen, deren Lösung zuvor mehrere Stunden oder gar Tage benötigt haben.

HARDWARENAHE ALGORITHMEN

Hohe Energiekosten machen den Betrieb von Hochleistungsrechnern zunehmend unrentabel. Als stromsparende und leistungsstarke Alternative bieten sich Grafikprozessoren (GPUs) und FPGAs an. Ihre Programmierung ist allerdings immer noch extrem aufwändig und sie sind nicht für alle Problemklassen geeignet.

Wir evaluieren Einsatzmöglichkeiten von GPUs und FPGAs in verschiedenen Anwendungsgebieten wie z.B. der Simulation atomarer Prozesse und molekularen Systeme. Als Mitbegründer des OpenFPGA-Konsortiums und der OpenAccelerator-Initiative treiben wir die Entwicklung einheitlicher Programmierstandards voran.

Die Arbeitsgruppe erforscht auch Methoden zur Erhöhung der Ausfalltoleranz in parallelen Speichersystemen. Wir haben verschiedene Varianten des Cauchy Reed-Solomon-Algorithmus auf Manycore-Prozessoren, GPUs, Cell und FPGAs implementiert und verglichen. Mit Hilfe von Markov-Modellen haben wir verschiedene Kodierungs- und Verteilungsschemata untersucht, die an einem realen verteilten Dateisystem, unserem XtreemFS-Dateisystem, für einen noch schnelleren Datenzugriff und erhöhte Zuverlässigkeit sorgen sollen.

„FIRST WE TAKE BERLIN...“ – DAS ONLINE-ARCHIV ZU „24H BERLIN“

REDUNDANTE DATENHALTUNG ZWISCHEN KINEMATHEK UND ZIB MIT DEM VERTEILTEN DATEISYSTEM XTREEMFS

Bearbeitet von: Björn Kolbeck, Kathrin Peter, Alexander Reinefeld, Florian Schintke, Thorsten Schütt

Kooperation: Stiftung Deutsche Kinemathek

Förderung: Landesinitiative Projekt Zukunft bei der Berliner Senatsverwaltung für Wirtschaft und Forschung

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/firstwetake



Im Bereich Film und Fernsehen sind die mit der Digitalisierung stetig wachsenden Datenmengen effizient und zuverlässig zu verwalten. Diese Daten müssen verschiedenen Einrichtungen, etwa Museen, aber auch der Öffentlichkeit direkt zur Verfügung gestellt werden können. Dazu bedarf es eines schnellen Zugriffs auf verteilte Speicherressourcen unter Berücksichtigung bereits etablierter Annotations- und Suchverfahren.

Dies wurde am Beispiel des gesamten Film- und Rohmaterials des Fernsehprogramms 24h Berlin (700 Stunden Filmmaterial) im Projekt „First we take Berlin...“ entwickelt und erprobt. Zur Speicherung und Verwaltung, zur Suche und zum Zugriff auf das Material verschiedener Formate dient ein verteiltes Softwaresystem mit zwei Ebenen: Die Datenrepräsentationsschicht stellt ein Suchinterface für ganz unterschiedliche Formen der Nutzung zur Verfügung. Die darunterliegende Datenschicht

garantiert die sichere und zuverlässige Speicherung der Daten – mithin eine generische Systemarchitektur. Erstmals werden auch verteilte Block-Erasure Codes zur effizienten redundanten Datenspeicherung eingesetzt (siehe folgende Doppelseite).

Das Projekt-Portal (Abb. 1) erlaubt eine flexible Navigation und Erkundung des in kurzen Sequenzen präsentierten Videomaterials. Die Navigation kann über die Dimensionen Zeitpunkt, geographischer Ort, Menschen, Stadtteil, Drehteam, Freitextsuche und über ca. 20.000 Schlagworte mit einem thematisch angepassten Thesaurus erfolgen (Abb. 2).

ARCHITEKTUR

Als Grundlage für die Datenschicht dient unser verteiltes Dateisystem XtreamFS. Sowohl Server als auch Clients können weltweit verteilt sein. Die Replikation erlaubt die Speicherung der Daten über mehrere Rechen-

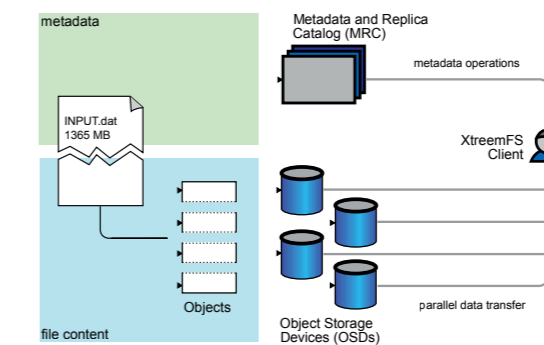


DAS PROJEKT IN KÜRZE: Als Fortführung des Projektes „24h Berlin“, bei dem zahlreiche Film-Teams einen kompletten Tag der Metropole aus diversen Blickwinkeln festhielten, entstand das Projekt „First we take Berlin...“. Im Gegensatz zur redaktionell gestalteten Fernsehausstrahlung im Jahr 2009 bietet das Online-Archiv große Teile des Rohmaterials navigierbar über Zeitpunkt, Drehort, Drehteam oder Schlagworte an und lädt dazu ein, das Material weiter zu nutzen und zu ergänzen. Das ZIB realisierte im Projekt eine ausfallredundante Datenhaltung an zwei Standorten auf der Basis des am ZIB entwickelten Dateisystems XtreamFS.

Reed-Solomon Codes erfüllen die MDS Eigenschaft und existieren für beliebige Parameter k und m . Die Redundanz wird berechnet mit Hilfe einer Kodierungsmatrix (Vandermonde oder Cauchy Matrizen). Daten werden in einem Datenvektor angeordnet. Die Multiplikation der Kodierungsmatrix mit dem Datenvektor erzeugt den Codevektor mit den redundanten Daten. Alle Berechnungen erfolgen in einem endlichen Feld (Galois-Feld 2^n) abhängig von der Wortgröße w , über die die Berechnungen erfolgen. Zum Recovery im Fehlerfall werden mit Hilfe der verbliebenen Daten (Daten- und Codeworte) und einer invertierten Submatrix der Kodierungsmatrix die verlorenen Daten durch eine Matrix-Vektor Multiplikation wiederhergestellt.

Eine vorteilhafte Eigenschaft dieser Codes ist die Kommutativität, die im Falle einer Aktualisierung eines Blocks ausgenutzt wird. Statt den gesamten Stripe neu zu berechnen, wird nur die Differenz zwischen dem alten und neuen Block an den Redundanzserver gesendet, mit dem jeweiligen Faktor der Kodierungsmatrix multipliziert und auf das Codewort aufaddiert.

zentren hinweg. Mittels Datenreplikation stellt XtreamFS sicher, dass Daten auch im Falle von Ausfällen einzelner Rechner oder ganzer Rechenzentren verfügbar sind. Zwei gekoppelte, replizierte Installationen bei der Stiftung Deutsche Kinemathek und am ZIB sorgen für Ausfalltoleranz.



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

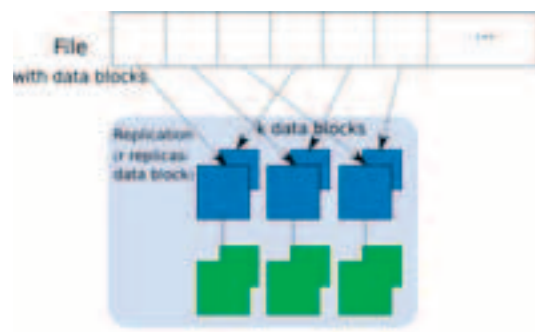
SKALIERBARES REPLIKATIONSprotokoll

Die Replikation der Datei-Inhalte wird in XtreamFS von den OSDs übernommen. Diese sorgen für die Verteilung der Daten und für die Konsistenz der Replikate. Um die Datenkonsistenz bei Änderungen sicherzustellen, verwendet XtreamFS die sogenannte Primary-Backup-Replikation. Dabei wird eines der Replikate zum Primary gewählt. Das Primary stellt dann sicher, dass alle Schreiboperationen in der richtigen Reihenfolge auf den anderen Replikaten (Backups) ausgeführt werden. Die Primary-Backup-Replikation bietet den Vorteil, dass ein einzelner Rechner die Reihenfolge der Schreiboperationen festlegt; es ist keine Koordination zwischen den Replikaten nötig. Dies führt zu einer einfacheren Implementation und effizienteren Kommunikation im Vergleich zu Replikationsverfahren mit Koordination. Für die Wahl des Primary Replikats verwenden wir in XtreamFS den dezentralen Lease-Koordinations Algorithmus Lease. Die Replikate handeln mittels Lease untereinander eine Lease aus, die einem Replikate die Primary-Rechte für einen begrenzten Zeitraum gibt. Fällt das Primary aus, so wird nach Auslaufen der Lease ein anderes Replikate zum Primary gewählt. Die Mehrheit der replizierten Dateisysteme verwenden einen zentralen Konfigurations-Server, um ein Primary zu wählen. Damit ist aber die Skalierbarkeit des Gesamtsystems durch den zentralen Dienst und dessen Durchsatz beschränkt. XtreamFS umgeht dieses Problem durch den Einsatz von Lease und erreicht dadurch echte Skalierbarkeit.

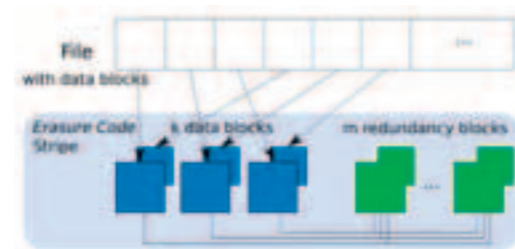
<http://www.first-we-take-berlin.de/>
<http://www.xtreamfs.org/>

FEHLERTOLERIERENDE CODES FÜR ZUVERLÄSSIGE DATENSPEICHERUNG

In großen verteilten Speichersystemen steigt mit wachsender Systemgröße die Wahrscheinlichkeit von Ausfällen und Datenverlust droht. Um dem entgegenzuwirken, werden Daten redundant gespeichert. Redundanz kann im einfachsten Fall durch Replikation erzeugt werden (Abb. 1), bei der zusätzlich Kopien von Daten gespeichert werden. Da die Replikation ein Vielfaches des Speicherplatzes der Originaldaten für Redundanz benötigt und dies gerade in großen Systemen zu einer Vervielfachung der Kosten führt, werden alternative Techniken eingesetzt. Maximum distance separable (MDS) erasure codes, hier als fehlertolerierende Codes bezeichnet, tolerieren mehr Fehlerkombinationen als Replikation bei gleicher Menge an Redundanz (z.B. Reed-Solomon Codes^{1,2}). Systematische fehlertolerierende Codes gruppieren k Datenblöcke in einem Stripe und berechnen daraus eine Menge von m Redundanzblöcken. Die $k+m$ Blöcke eines Stripes werden auf $k+m$ fehlerunabhängige Speicherserver verteilt (Abb. 2). Im Fehlerfall ermöglicht die Redundanz die Datenwiederherstellung bei bis zu m gleichzeitigen Ausfällen.



Die Parameter k und m sind beliebig wählbar und bestimmen die Fehlertoleranz sowie die



Anzahl der beteiligten Speicherserver. Nachteile beim Einsatz fehlertolerierender Codes sind zusätzliche Berechnungen zur Kodierung (siehe Marginalien), die Aktualisierung der Daten ist komplexer und die Reparaturkosten höher.

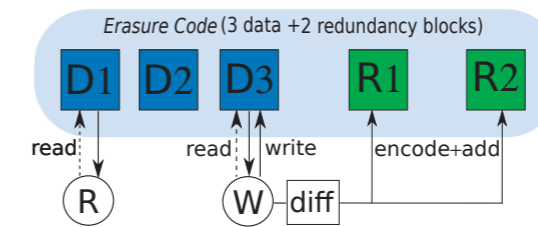
DATENKONSISTENZ BEI KONKURRIERENDEM ZUGRIFF

Das Problem der Aktualisierungsreihenfolge tritt auf, wenn Clients konkurrierend auf Datenblöcke zugreifen und Clients wie auch Speicherserver jederzeit ausfallen können. Es besteht die Gefahr, dass Daten und Redundanz in einem inkonsistenten Zustand hinterlassen werden, welcher die Konsistenzanforderungen des Dateisystems (sequentielle Konsistenz) verletzt und die Fehlertoleranz reduziert. Die Ursache ist die spezielle Abhängigkeit zwischen Daten innerhalb eines Stripes (Abb. 2). Jeder Redundanzblock ist von allen Datenblöcken abhängig: Sobald eine Änderung eines Datenblocks erfolgt, müssen alle Redundanzblöcke des Stripes ebenfalls aktualisiert werden. Im Vergleich dazu führt bei der Replikation eine Änderung des Datenblocks nur zur Änderung der Kopien, unabhängig von Modifikationen anderer Datenblöcke. Damit führten fehlertolerierende Codes eine Abhängigkeit zwischen eigentlich unabhängigen Datenblöcken im Stripe ein. Die Aktualisierung eines Blocks ist in mehrere Schritte unterteilt (Abb. 3):

◀ Abb. 2: Stripe mit r -facher Replikation. Die Replikation fügt ein Vielfaches der Originaldatengröße als Redundanz hinzu.

◀ Abb. 1: Stripe mit einem $(k+m)$ fehlertolerierenden Code. Die Redundanzblöcke sind nur einen Anteil (m/k) der Originaldatengröße.

▶ Abb. 3: Lese- und Schreibzugriff

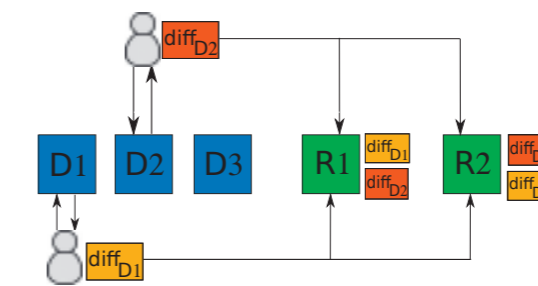


▶ Abb. 5: Lese- und Schreibzugriffe auf Blöcke (128 kB) mit $k=6$ Daten- und 2 Redundanzblöcken mit zwei Clients.

▶ Abb. 4: Beispiel für zwei konkurrierende Schreiboperationen auf den Datenblöcken. Ein zusätzlicher Clientausfall führt zu Inkonsistenzen zwischen Daten und Redundanz. Dadurch könnte ein Recovery im Falle eines weiteren Serverausfalls unmöglich werden.

- Lesen des alten Datenblocks
- Berechnung der Differenz zwischen alten und neuen Daten (diff)
- Schreiben des neuen Datenblocks und aufaddieren der kodierten Differenz

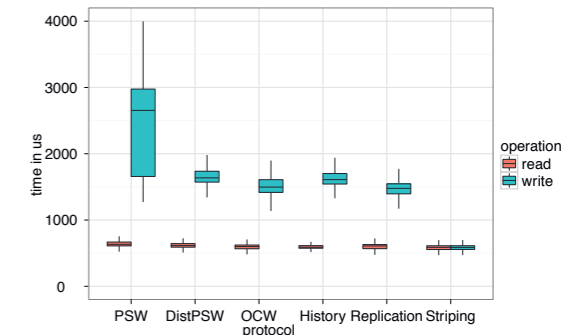
Abb. 4 stellt ein Problem beim konkurrierenden Zugriff dar, bei dem die Aktualisierung der beiden Clients in einer beliebigen Reihenfolge auf den Redundanzservern erscheinen.



KONSISTENZPROTOKOLLE

Ziel der Protokolle ist, trotz konkurrierender Clients den konsistenten Datenzugriff zu garantieren und andererseits die Fehlertoleranz des Stripes zu erhalten. Wir haben zwei Gruppen von Protokollen entwickelt, die eine Zugriffsreihenfolge zum einen durch eine zeitliche Verzögerung (time), zum anderen durch die Speicherung mehrerer Versionen (space)

durchsetzen³. Die client-zentrierten PSW Protokolle (pessimistic sequential writing) serialisieren den Zugriff mit Hilfe eines Masters pro Stripe bzw. Datenblock. Die OCW Protokolle (optimistic concurrent writing) erlauben die parallele Ausführung konkurrierender Zugriffe auf Daten eines Stripes. Dies ist möglich durch die Pufferung mehrerer Versionen eines Blocks, auf die bei Ausfällen zurückgegriffen wird.



Die Protokolle wurden implementiert und mit einem effizienten pufferfreien Protokoll, Master-Slave Replikation und Striping ohne Redundanz verglichen (Abb. 5). Die Untersuchungen zeigen unter anderem, dass Replikation schnell ist, OCW aber zusätzlich eine höhere Ausfalltoleranz bietet.

ZUSAMMENFASSUNG

Neben dem Problem der konsistenten Aktualisierungen beschäftigen wir uns mit der Beschleunigung der Kodierungsoperationen mit Hilfe von FPGAs. Zur Optimierung der Reparatur betrachten wir Regenerating Codes. Zur Evaluation setzen wir unsere Verfahren auch in praktischen Projekten wie dem Film-Portal „First we take Berlin...“ ein.

¹ I. Reed and G. Solomon, Polynomial codes over certain finite fields in SIAM Journal (8), 1960.

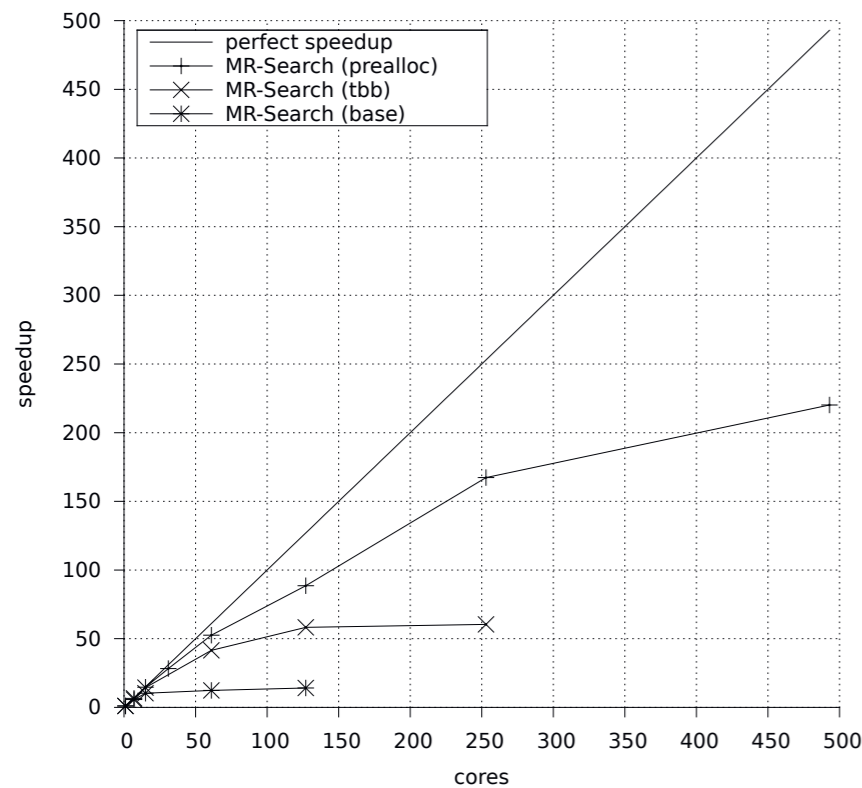
² James S. Plank, A tutorial on Reed-Solomon coding for fault-tolerance in RAID-like systems in Software-Practice & Experience, 1997

³ Kathrin Peter, Alexander Reinefeld, Consistency and fault tolerance for erasure-coded distributed storage systems, DDC 2012.

EFFIZIENTE NUTZUNG GROSSER SHARED-MEMORY SYSTEME

GRAPHSUCHALGORITHMEN MIT MAPREDUCE AUF DER SGI ULTRAVIOLET 1000

Bearbeitet von: Robert Döbbelin, Thorsten Schütt, Alexander Reinefeld
 Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/mrsearch



MapReduce ist ein Programmierparadigma, das ursprünglich von Google für die Erstellung von Suchindizes für Web-Seiten entwickelt wurde. Inzwischen gibt es viele weitere Anwendungsfelder, insbesondere in der kombinatorischen Optimierung, der Software-Verifikation, der Bioinformatik oder im maschinellen Lernen.

Seit dem Jahr 2010 verfügt das ZIB im Rahmen der zweiten Ausbaustufe des HLRN-II über fünf SGI Altix UltraViolet 1000 (UV). Solche Systeme sollen dank ihres globalen Adressraums einfach zu programmieren sein, da eine große Anzahl von Threads auf einen gemeinsamen

Speicher zugreifen kann. Wir haben unsere MapReduce-Bibliothek MR-Search auf diesen Maschinen evaluiert und mussten dabei jedoch feststellen, dass die Effizienz insbesondere durch unzureichende Mechanismen zur Speicherallokation eingeschränkt ist.

MAPREDUCE

Das MapReduce-Paradigma zeichnet sich durch eine einfache Programmierbarkeit paralleler, datenintensiver Programme aus. Der Programmierer erstellt lediglich zwei Funktionen, eine Map- und eine Reduce-Funktion. Die Laufzeitumgebung organisiert die Parallelisierung und Verteilung der Daten über die Rechner. Falls

Eine **SGI Altix UltraViolet 1000 (UV)** enthält 32 Einschübe mit jeweils zwei 8-Kern-Intel Xeon X7560 Prozessoren, zwei mal 32 GB RAM und einem UV Hub Chip. Jeder UV Hub ist mit vier NUMALink5 Ports ausgestattet. Das NUMALink5 Netzwerk verbindet alle Einschübe zu einem großen shared-memory System. Ein Einschub wird für das Betriebssystem reserviert. Für die Anwendung stehen somit 496 Rechenkern und 2TByte Hauptspeicher zu Verfügung.

Uniform Memory Access (UMA)

Systeme, bei denen alle Prozessoren über einen Bus an einen gemeinsamen Hauptspeicher angebunden sind. Die Zugriffskosten für jeden Prozessor auf den Speicher sind identisch.

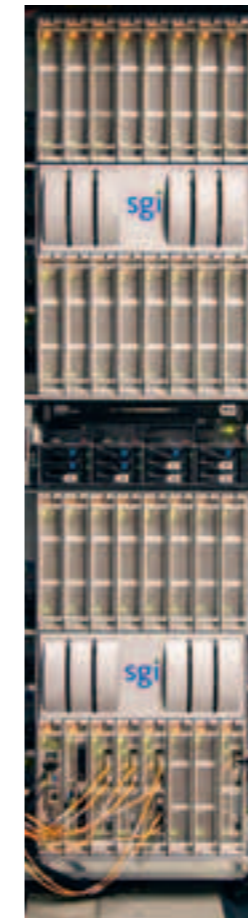
Non-Uniform Memory Access (NUMA)

Shared-memory Systeme, bei denen jeder Prozessor einen eigenen lokalen Hauptspeicher besitzt, auf den er direkt zugreifen kann. Der Zugriff auf den Speicher anderer Prozessoren erfolgt über ein Netzwerk (vgl. NUMALink) und ist somit langsamer als ein lokaler Zugriff. Hierfür ist die Distanz zwischen



DAS PROJEKT IN KÜRZE: MR-Search ist eine Programmbibliothek für hochparallele Graphsuchalgorithmen auf der Basis von MapReduce. Die Programmbibliothek ermöglicht es, denselben Algorithmus sowohl auf Multi-Core-Rechnern als auch auf Supercomputern auszuführen.

Prozessor und Speicherbank ausschlaggebend. Während in kleinen NUMA-Systemen mit 2 oder 4 Sockeln ein Prozessor nur wenige Zentimeter von jeder Speicherbank entfernt ist, sind es in einem großen System wie der SGI UV einige Meter zwischen Prozessor und Hauptspeicher.



SGI Altix UltraViolet 1000

Prozesse während der Programmausführung ausfallen, werden sie automatisch durch neue ersetzt, ohne dass das Programm abbricht.

MR-Search ist eine am ZIB entwickelte Programmbibliothek für hochparallele Graphsuchalgorithmen auf der Basis von MapReduce.¹ Unser Fokus liegt auf der Ausführung der Berechnung im Hauptspeicher. Da die Größe der Ausgabe eines MapReduce-Schritts a priori nicht bekannt ist, verwenden wir Arrays dynamischer Größe, die durch eine Kapazität k maximal speicherbarer Elemente und der Anzahl s aktuell gespeicherter Elemente definiert sind. Neue Elemente können eingefügt werden, solange $k < s$ ist. Andernfalls wird die Kapazität vergrößert, indem Speicher der Größe $2k$ reserviert wird, die Daten in den neuen Speicherbereich kopiert werden und der alte Speicher freigegeben wird.

PROGRAMMIERUNG VON NUMA-SYSTEMEN

Fordert ein Programm Hauptspeicher vom Betriebssystem an, bekommt es lediglich einen virtuellen Adressbereich. Der erste Zugriff auf diese Adressen löst einen Seitenfehler (page fault) aus und das Betriebssystem beginnt den virtuellen Adressen physikalische Speicherseiten zuzuordnen. Dabei werden Seiten eines NUMA-Knotens gewählt, der sich in der Nähe des ausführenden Threads befindet. Beim Freigeben von Speicher wird dieser dem Allokator übergeben. Der kann das Speicherfragment an das Betriebssystem freigeben oder es in seinem Cache behalten, um damit spätere Anfragen bedienen zu können. Fordert ein Thread auf einem anderen Prozessor Speicher an, kann er somit ein Speicherfragment erhalten, welches auf einem entfernten NUMA-Knoten liegt. Damit dies nicht geschieht, sind die Programmierer dazu angehalten, die Ausführung von

Threads auf einzelne CPU-Kerne zu begrenzen. Dennoch kann durch wiederholtes Freigeben und Allokieren von Speicher die Datenlokalität beeinträchtigt werden.

SPEICHERALLOKATOREN

Speicheralkotoren haben eine lange Tradition für die Hauptspeicherverwaltung. Sie bilden eine Schicht zwischen Anwendung und Betriebssystem und verwalten den Speicher, der dem Programm zugeordnet ist. Ihre primäre Aufgabe besteht darin, teure Kontextwechsel für das Allokieren neuen Speichers zu vermeiden, sowie die Speicherfragmentierung und den totalen Speicherbedarfs zu reduzieren.

Der Allokator hat ebenfalls Einfluss darauf, welche Speicherseiten aus seinem Cache an welchen Thread ausgegeben werden. Somit könnte dieser, in Hinblick auf NUMA-Systeme, den Effekt von entfernten Speicherseiten begrenzen. In unserer Untersuchung war jedoch kein Allokator dazu in der Lage. Wir haben MR-Search mit verschiedenen Allokatoren evaluiert. Abb. 1 zeigt den Geschwindigkeitsgewinn bei der Ausführung unseres Benchmarkprogramms für bis zu 493 Prozessorkernen. Die Ergebnisse von MR-Search mit dem Standardallokator (base), sowie einem für Multi-Core-Rechner spezialisiertem Allokator von Intel (tbb) weisen eine stark begrenzte Skalierbarkeit auf. Lediglich durch Vorallozierung aller Ausgabepuffer (prealloc) und damit dem Umgehen des Allokators konnte ein weiterer Geschwindigkeitszuwachs erzielt werden.

¹ T. Schütt, A. Reinefeld, R. Maier: MR-Search: Massively Parallel Heuristic Search. Concurrency and Computation: Practice and Experience. (in Druck)

¹ R. Döbbelin, T. Schütt, A. Reinefeld: MapReduce on Large Shared-Memory Systems. An Analysis of SMP Memory Allocators. Fifth International Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2), 2012

EINE KOMPAKTE SYMBOLISCHE REPRÄSENTATION VON ZEITREIHEN

Bearbeitet von: Patrick Schäfer, Mikael Höggqvist, Thomas Steinke
 Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2011/sfa

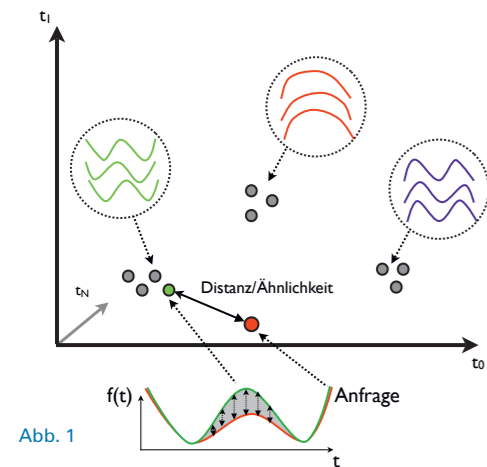


Abb. 1

Zeitreihen sind in Wissenschaft und Wirtschaft von zentraler Bedeutung. Sie erfassen Ereignisse über einen längeren Zeitraum hinweg und bilden dadurch sehr umfangreiche Datenmengen, die nur schwer zu analysieren sind. Die Datenpunkte sind in der Regel reelle Zahlen. Bei der Analyse von Zeitreihen wird häufig nach Ähnlichkeiten gesucht, wobei eine reellwertige Distanzfunktion als Maß der Ähnlichkeit herangezogen wird. Typischerweise wird hierfür die Euklidische Distanz eingesetzt.

MEHRDIMENSIONALER RAUM

Wird jeder Messzeitpunkt als eigene Dimension interpretiert, können Zeitreihen als mehrdimensionale Vektoren gedeutet werden (siehe Abb. 1). Für die Ähnlichkeitssuche wird die Dimensionalität der Daten um eine Größenordnung reduziert, so dass mehrdimensionale Indexstrukturen effizient eingesetzt werden können. Effizient bedeutet hier, dass der Ähnlichkeitsvergleich mittels Index schneller als ein sequentieller Vergleich aller Zeitreihen ausgeführt werden kann.

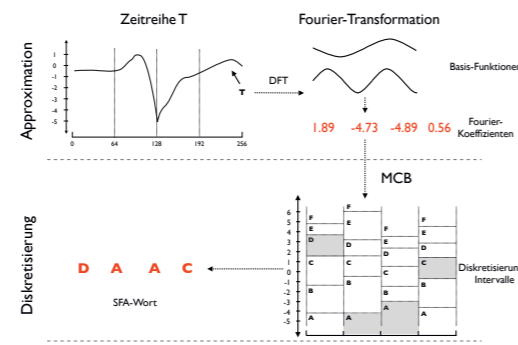


Abb. 2

DIMENSIONSREDUKTION

Dimensionsreduktion wird durch Approximation erreicht, indem eine Zeitreihe der Länge n durch eine andere Zeitreihe weit geringerer Länge m repräsentiert wird. Damit verringert die Dimensionsreduktion den Speicherbedarf und erlaubt die effiziente Indizierung mit mehrdimensionalen Indexstrukturen. Dimensionsreduktion bedeutet jedoch Informationsverlust und führt zu falschen Ähnlichkeitstreffern – verursacht durch unähnliche Zeitreihen, deren Approximationen ähnlich sind.

Damit der ähnlichkeitsbasierte Vergleich der Approximationen das gleiche Resultat liefert wie der Vergleich zwischen den Originalzeitreihen, setzt man exakte Dimensionsreduktionsverfahren ein. Diese basieren z.B. auf Fourier-Transformation, Eigenwerten, Wavelets, Tschebyscheff-Polynomen, Liniensegmenten, Mittelwerten oder Symbolen. Dabei müssen die falschen Ähnlichkeitstreffer über einen zusätzlichen Distanzvergleich zu den Originalzeitreihen herausgefiltert werden.

Diskrete Fourier-Transformation (DFT)

Jede Zeitreihe der Länge n kann verlustfrei durch n sinusoidale Wellen repräsentiert werden. Jede Welle wird dabei durch eine komplexe Zahl (Fourier-Koeffizient) dargestellt. Hierdurch wird die Zeitreihe im Frequenzraum repräsentiert.

Die Fourier-Transformation konzentriert die meisten Informationen in den ersten Fourier-Koeffizienten, die den groben Verlauf der Zeitreihe wiedergeben. Man approximiert eine Zeitreihe daher, indem man sie durch die ersten Fourier-Koeffizienten darstellt.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: SFA ist eine symbolische Repräsentation von Zeitreihen. Der SFA Trie ist ein Präfixbaum, der über die Präfixe der SFA-Repräsentationen aufgebaut wird. Im SFA Trie werden Zeitreihen anhand einer variablen Länge repräsentiert. Das erlaubt es, sowohl sehr hochdimensionale Zeitreihen als auch Terabyte-große Datensätze hinsichtlich ihrer Ähnlichkeit zu analysieren.

Unser Beitrag: Multiple Coefficient Binning (MCB)

Multiple Coefficient Binning ist ein Verfahren zur Diskretisierung von Zeitreihen. Das Ziel ist es, den Verlust an Informationen zu minimieren. In einem Vorverarbeitungsschritt werden daher die Fourier-transformierten Zeitreihen in mehrere Gruppen eingeteilt. In der i-ten Gruppe befinden sich dabei jeweils die i-ten Fourier-Koeffizienten aller Zeitreihen. Für jede der Gruppen werden mittels Equi-Depth-Binning die Diskretisierungsintervalle mit minimalem Informationsverlust bestimmt. Anschließend können diese Intervalle zur Diskretisierung der Fourier-Transformationen von Zeitreihen eingesetzt werden.

Das Problem bei der Anwendung von Dimensionsreduktionsverfahren liegt in der Wahl der optimalen Dimensionalität der approximierten Daten, da sowohl eine zu hohe als auch eine zu geringe Dimensionalität beim Ähnlichkeitsvergleich zu einer Vielzahl von falschen Ähnlichkeitstreffern führt, so dass eine Suche mittels Index länger dauern kann, als der sequentielle Vergleich aller Zeitreihen.

DIMENSIONSREDUKTION MITTELS SFA

Zur Lösung dieses Problems haben wir mit der Symbolic Fourier Approximation (SFA) und dem SFA Trie ein Dimensionsreduktionsfahren und einen Index eingeführt, die eine variable Dimensionalität der approximierten Daten verwenden: Ähnliche Zeitreihen werden durch viele Dimensionen repräsentiert, während unähnliche Zeitreihen durch wenige Dimensionen in den approximierten Daten dargestellt werden.

Die Transformation einer Zeitreihe in die symbolische Repräsentation SFA besteht aus zwei Phasen: 1) der Approximation und 2) der Diskretisierung (siehe Abb. 2). Die Approximation basiert auf der diskreten Fourier-Transformation. Die Diskretisierung der Fourier-Koeffizienten der Approximationsphase resultiert in dem SFA-Wort.

Durch die Approximation wird die Dimensionalität und damit der Speicherbedarf der Daten um einen Faktor 10 bis 50 reduziert. Die Diskretisierung basiert auf dem Multiple Coefficient Binning (MCB) Verfahren. Das Verfahren erlaubt eine weitere Speicherreduktion um den Faktor 8, wenn an Stelle von 8 Byte Double- ein 1 Byte-Datentyp verwendet wird.

INDIZIERUNG: SFA TRIE

Das Ziel eines Indexes ist es, den Suchraum in gleichgroße Gruppen einzuteilen und einen schnellen Zugriff auf jede Gruppe zu gewährleisten. Mit dem SFA Trie wurde am ZIB ein Index entwickelt, der die Gruppierung anhand des Präfix der SFA-Wörter realisiert. Falls in einer Gruppe zu viele Zeitreihen enthalten sind, wird das Präfix inkrementell verlängert, bis alle Zeitreihen gleichmäßig über alle Gruppen verteilt wurden.

Der SFA Trie ist im Kern ein Präfixbaum (englisch trie, von retrieval, nicht zu verwechseln mit dem einfachen Baum, tree), der durch schrittweise Verlängerung des Präfix der SFA-Approximationen aufgebaut wird. Das Besondere am SFA Trie ist, dass dieser in der Tiefe anstelle der Breite wächst, wenn ein Präfix verlängert wird.

Der SFA Trie nutzt die Eigenschaft, dass SFA im Frequenzraum definiert ist. Dadurch enthält ein beliebig langes Präfix Informationen über die gesamte Zeitreihe und nicht nur einen kleinen Abschnitt. Wird das Präfix verlängert, so werden zusätzliche Details hinzugefügt. Weiter haben die ersten Symbole einen höheren Informationsanteil über die Zeitreihe als die letzten Symbole, die schnell ändernde Anteile der Zeitreihe beschreiben.

FAZIT

SFA mit dem SFA Trie ist ein exaktes Verfahren für den Ähnlichkeitsvergleich von Zeitreihen und weist einen sehr geringen Speicherbedarf auf, da Zeitreihen approximiert und durch eine Folge von Symbolen repräsentiert werden. Durch den Einsatz einer symbolischen Repräsentation variabler Länge war es uns möglich, sowohl über einen langen Zeitraum erfasste Zeitreihen als auch Terabyte-große Datensätze auf heutigen Standard-PCs zu analysieren.

¹ Patrick Schäfer, Mikael Höggqvist. SFA: A Symbolic Fourier Approximation and Index for Similarity Search in High Dimensional Datasets (EDBT 2012).

PROJEKTE DER ABTEILUNG PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: www.zib.de/PVS

XTREEMFS –

Ein skalierbares, verteiltes Dateisystem

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/xtreemfs.html

Mitarbeiter: M. Berlin, B. Kolbeck, J. Stender, C. Lorenz, F. Langner, M. Noack
Partner: NEC (Deutschland), BSC (Spanien), ICAR-CNR (Italien)
Forschungsförderung: EU, Integrated Projects XtreamOS und CONTRAIL

Inhalt: XtreamFS ist ein am ZIB entwickeltes, verteiltes, föderiertes und repliziertes Dateisystem, das den Nutzern von Cluster-, Grid- oder Cloud-Infrastrukturen einen einfachen und schnellen Zugriff auf ihre Dateien ermöglicht. Es verfügt über Mechanismen, um den Ausfall einzelner Datenserver oder Netzwerkverbindungen zu tolerieren, hohe Latenzzeiten zu verbergen und unterschiedliche I/O-Bandbreiten auszugleichen.

CONTRAIL – Open Computing Infrastructures for Elastic Services

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/contrail.html

Mitarbeiter: M. Berlin, R. Döbbelin, B. Kolbeck, J. Stender, T. Schütt, C. Lorenz, F. Langner,
Partner: CNR (Italien), Constellation Technologies (UK), Genias Benelux (Niederlande), HP-Italy Innovation Centre (Italien), INRIA (Frankreich), STFC (UK), Petals Link (Frankreich), Tiscali (Italien), VU Amsterdam (Niederlande), XLAB Industries (Slowenien)
Forschungsförderung: EU (FP7-ICT-257438)
Inhalt: Entwicklung eines Open-Source Software-Stacks für Cloud-Provider. Neben der Virtualisierung von Ressourcen (IaaS) wird dieser auch für das Bereitstellen vordefinierter Benutzerapplikationen in der Cloud benutzt (PaaS). Ein Hauptaugenmerk von Contrail ist die Föderierung von Clouds, um Anwenderprogramme auf mehreren Cloud-Systemen ausführen zu können.

4CAAST –

Building the PaaS Cloud of the Future

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/4caast.html

Mitarbeiter: N. Kruber, F. Schintke, T. Schütt
Partner: Telefónica, SAP, France Telecom, Telecom Italia, Ericsson, Nokia Siemens Networks, UP Madrid, Uni Stuttgart, Uni Tilburg, Uni St Gallen, Bull SAS, 2nd Quadrant, Flexiant, UC Madrid, NTU, Bonitasoft
Forschungsförderung: EU (FP7-ICT-258862)

Inhalt: Entwicklung einer Cloud-Plattform, die es ermöglicht, Dienste und Anwendungen zusammenzustellen, auszuführen, zu verwalten und zu handeln. Wir bringen unsere Scalaris-Datenspeichersoftware in das Projekt ein und implementieren Methoden, um plötzlich steigende Anfragemengen (sog. flash crowds) flexibel bedienen zu können. Für die Einbettung in PostgreSQL wird Scalaris um entsprechende Schnittstellen ergänzt.

PneumoGrid

URL: www.pneumogrid.de

Mitarbeiter: K. Peter, T. Steinke, M. Lindner
 Wir stellen Ressourcen für den Betrieb eines Bildarchivierungs- und Kommunikationssystems (PACS) bereit, das medizinische Bilddaten der Berliner Charité für die Nutzer des PneumoGrid bereithält. Gemeinsam mit der Charité werden Anwendungsszenarien, die eine Visualisierung der Prozesskette erfordern, auf dem Visualisierungscluster am ZIB erprobt.

MOSGRID – Molecular Simulation Grid

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/mosgrid.html

Mitarbeiter: T. Steinke, P. Schäfer
Partner: Universitäten Köln, Tübingen, Paderborn, Dresden; Bayer, BioSolveIT, COSMOlogic, GETLIG & TAR, Origines, FZ Jülich, Turbomole, Sun Microsystems, Schrödinger

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Das MoSGrid-Projekt ermöglicht die Nutzung verteilter Systeme für Molekülsimulationen, indem es Wissenschaftler aus dem chemischen Umfeld bei der Ausführung von Simulationsrechnungen im Grid unterstützt. Über ein webbasiertes Portal wird den Nutzern Zugriff auf Anwendungs-Workflows und Datenrepositorien gegeben. Letztere beinhalten Moleküldatenbanken, um auf Simulationsergebnisse und -protokolle für die bereitgestellten Anwendungen zugreifen zu können. Unsere Aufgabe im Projekt besteht in der Entwicklung von Technologien zum Betrieb von chemischen Datenrepositorien und deren technischer Umsetzung.

DGI-2 – D-Grid-Integrationsprojekt 2

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/dgi-2.html

Mitarbeiter: F. Schintke, M. Höggqvist, K. Peter
Partner: BusinessValues IT-Service, DESY,

DFN-CERT, FZ Jülich, KIT, FhG, LRZ, ParTec, RRZN, T-Systems Solutions für Research, Uni Dortmund

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Als Infrastruktur für das Management verteilter Daten im D-Grid-Verbund haben wir Stellaris für semi-strukturierte Daten auf Basis des Resource Description Frameworks (RDF) und das regelbasierte iRODS-Datenmanagementsystem des San Diego Supercomputing Centers für unstrukturierte Daten entwickelt, installiert, evaluiert, erweitert und für die Nutzer betrieben.

WissGrid – Grid für die Wissenschaft

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/wissgrid.html

Mitarbeiter: F. Schintke, K. Peter
Partner: Universitäten Göttingen, Wuppertal, Dortmund, Heidelberg, Köln, Trier; Astrophysikalisches Institut Potsdam, Staats- u. Universitätsbibliothek Göttingen, Universitätsmedizin Göttingen, AWI Bremerhaven, DESY, DKRZ, Inst. für Deutsche Sprache Mannheim

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Als D-Grid-Projekt hat sich WissGrid die nachhaltige Etablierung von organisatorischen und technischen Strukturen für den akademischen Bereich im D-Grid zum Ziel gesetzt. Dabei bündelt WissGrid die heterogenen Anforderungen aus verschiedenen wissenschaftlichen Disziplinen und entwickelt so konzeptionelle Grundlagen für die nachhaltige Nutzung der Grid-Infrastruktur sowie IT-technische Lösungen.

DGSI – D-Grid Scheduler Integration

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/dgsi.html

Mitarbeiter: M. Höggqvist
Partner: Universitäten Paderborn, Dortmund, Dresden, Heidelberg; GWDG, LRZ, Platform Computing, FhG SCAI, FhG FIRST, Bonn-Aachen Int. Center f. Information Tech.

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Das DGSI-Projekt beschäftigt sich mit der Interaktion und Kooperation zwischen autonomen Schedulingern im Grid. Das Ziel ist die Verbesserung der Ressourcenauslastung und eine gerechtere Verteilung der Rechenzeit im D-Grid-Verbund. Dazu sollen Meta-Scheduler über zwei Delegationsmechanismen, der Aktivitäts-Delegation und der Ressourcen-Delegation, miteinander kooperieren. Soweit möglich werden in DGSI etablierte Standards verwendet.

INAD – Infrastructure for General Access to Climate Data

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/c3-inad.html

Mitarbeiter: J. Bachmann, S. Plantikow, M. Jorra, U. Golas, F. Schintke
Partner: AWI Bremerhaven, FUB, CSC, DKRZ, TU Dortmund, Uni Köln, DLR, DFD, SISTEC, PIK

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Für die Klimawissenschaften soll eine Umgebung zur verteilten Abarbeitung von diagnostischen Workflows im Grid implementiert werden. Das ZIB entwickelt hierfür eine „Representational State Transfer Architektur“, kurz REST Web Services für das Management verteilter Daten.

ASTROVDZ

URL: <http://www.zib.de/de/pvs/projekte/archiv-details/article/astro-vdz.html>

Mitarbeiter: F. Schintke, P. Schäfer
Partner: AIP Potsdam

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Einrichtung und Betrieb eines verteilten, virtuellen Datenzentrums für astronomische Daten unter Nutzung des verteilten Dateisystems XtreamFS.

„FIRST WE TAKE BERLIN...“

URL: <http://www.zib.de/de/projekte/aktuelle-projekte/projekte-detail/article/first-we-take-berlin.html>

Mitarbeiter: B. Kolbeck, K. Peter, F. Schintke, T. Schütt, A. Reinefeld
Partner: Stiftung Deutsche Kinemathek – Museum für Film und Fernsehen
 Forschungsförderung: Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Technik und Frauen
Inhalt: Aufbau eines Systems, das beispielhaft das gesamte Film- und Rohmaterial des Fernsehprogramms 24h Berlin einer öffentlichen Nutzung zur Verfügung stellt. In vier Teilprojekten werden exemplarisch zugleich neue Verfahren der Präsentation, Bereitstellung und Archivierung digitaler Filme entwickelt.

D-GRID KERNKNOTEN

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/dgrid-kernknoten.html

Mitarbeiter: F. Schintke, M. Höggqvist, B. Kolbeck, K. Peter, T. Steinke
Partner: div. Partner des D-Grid-Verbunds
Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Als Teil der deutschlandweiten D-Grid-Infrastruktur betreiben wir Speicher-

und Rechenressourcen mit ca. 350 TByte Festplattenspeicher und 480 Rechenknoten, sowie Archivkomponenten zur Datensicherung auf Magnetbändern. Mit den vom BMBF geförderten Ressourcen wird erstmals in Deutschland eine einheitliche, gemeinsam nutzbare Rechenumgebung über sehr viele Standorte hinweg realisiert, die auch wir für unsere Simulationen und Praxistests verteilter und paralleler Anwendungen nutzen.

ENHANCE – Enabling heterogeneous hardware acceleration using novel programming and scheduling models

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/enhance.html

Mitarbeiter: T. Steinke, S. Dreßler, F. Wende
Partner: Uni Paderborn, Fraunhofer SCAI, Uni Bielefeld, TMS mbH, TWT Science & Innovation GmbH, GETLIG & TAR GbR

Forschungsförderung: BMBF

Inhalt: Es werden Software-Werkzeuge für heterogene Systeme (Multi-Core, GPU, FPGA) entwickelt und exemplarisch auf reale Anwendungen im industriellen und akademischen Umfeld (Fahrzeug-Optimierung, Schadstoffausbreitung, Next-Generation-Sequencing-Analyse, Wirkstoffentwurf) abgestimmt. Wir bearbeiten dabei Themen der Leistungsmodellierung und -Vorhersage sowie Methoden der Hardware-Abstraktion für Anwendungsentwickler.

METRIK – Modellbasierte Entwicklung von Technologien für selbstorganisierende dezentrale Informationssysteme im Katastrophenmanagement

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projekt-details/article/metrik.html

Mitarbeiter: J. Geibig, K. Peter
Forschungsförderung: DFG Graduiertenkolleg

Inhalt: Am METRIK-Graduiertenkolleg der Humboldt-Universität sind wir mit den Forschungsthemen „Selbstorganisierende Datenreplikation in drahtlosen Maschennetzwerken“ und „Fehlertolerierende Codes für verteilte Datenspeicherung“ beteiligt. Wir entwickeln verteilte Algorithmen, die selbst bei korrelierten Knotenausfällen (z. B. im Erdbebengebiet) die Verfügbarkeit wichtiger Daten garantieren.

IRIS – Integratives Forschungsinstitut für die Naturwissenschaften Adlershof

URL: www.iris-adlershof.de

Mitarbeiter: A. Reinefeld, T. Steinke, H. Stüben

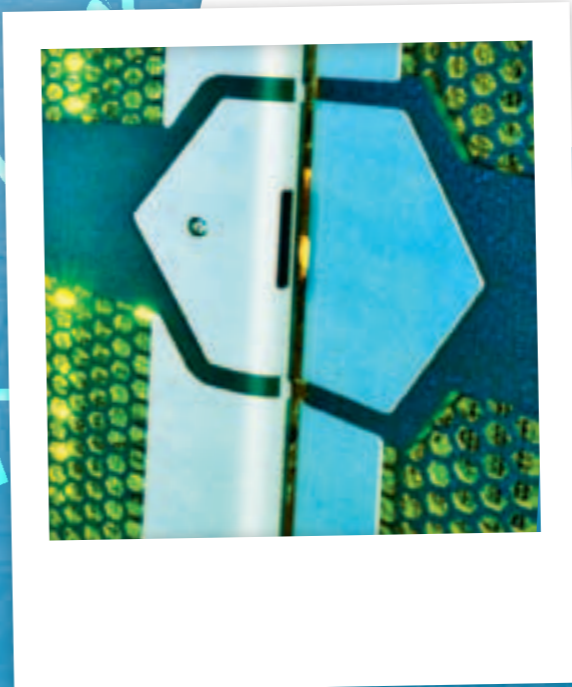
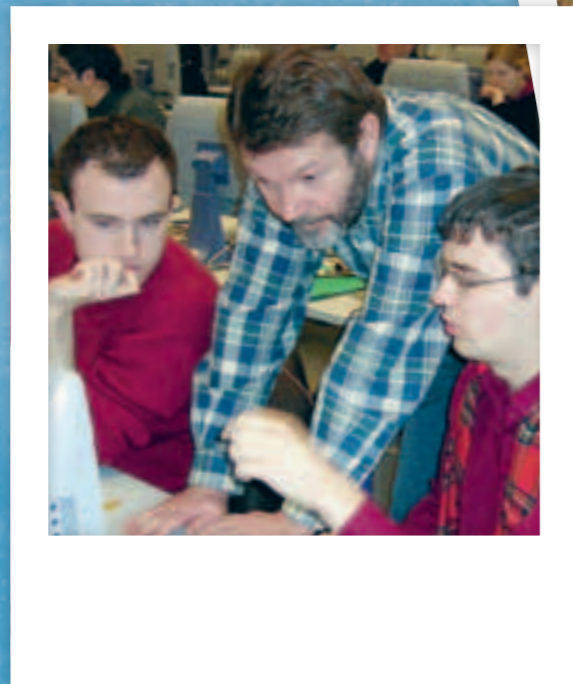
Partner: HU Berlin, HZB, FHI
 Forschungsförderung: HU Berlin

Inhalt: Als assoziiertes Gründungsmitglied bringen wir unsere Erfahrungen in der interdisziplinären Zusammenarbeit von Wissenschaftlern der Physik, Chemie und Mathematik/Informatik ein. Wir bieten Lehrveranstaltungen zum Einsatz von MPI und OpenMP an. Es ist geplant, die IRIS-Partner bei der Parallelisierung ihrer Anwendungen für massiv-parallele Multicore-Systeme zu unterstützen.



SUPERCOMPUTING

- Ladeseigene Glasfasernetz
- - - angemietete Strecken
- Brain-Netzknoten
- Behördenstandorte
- Wissenschaftsstandorte



DER HLRN-II-SUPERCOMPUTER AM ZIB

Bearbeitet von: Hubert Busch, Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Isaac Hailperin, Bernd Kallies, Detlef Kehl, Matthias Läuter, Christian Schimmel, Frank Schmitz, Manfred Stolle, Thomas Steinke, Hinnerk Stüben, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny
Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/hpc/serv



Das HLRN-System am ZIB umfasst insgesamt 49 Computerschränke. Dabei befinden sich die Rechnersysteme in 28, die Plattensysteme in 13, die InfiniBand-Netzwerk-Switche in 6 und die Verwaltungsserver in 2 Schränken.

Das ZIB betreibt im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) parallele Supercomputersysteme, die zu den leistungsfähigsten sowohl in Deutschland als auch weltweit gehören. In Verbindung mit der wissenschaftlichen Fachberatung stellt dieses System eine zentrale Dienstleistung des ZIB für Wissenschaft und Forschung dar.

DER HLRN-VERBUND

Im HLRN-Verbund haben sich die sechs Bundesländer Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein zusammengeschlossen, um das wissenschaftliche Hoch- und Höchstleistungsrechnen im norddeutschen Raum zu fördern. Mit dem Beschluss des Landes Brandenburg, dem HLRN-Verbund beizutreten, werden in Zukunft auch die Brandenburger Wissenschaftler von der Supercomputer-Infrastruktur und der HPC-Fachberatung profitieren können. Als Berliner freuen wir uns besonders über diese Entscheidung, denn mit dem Beitritt Brandenburgs werden die traditionell guten Beziehungen zu den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaft-

lern im Nachbarland weiter gestärkt. Ergänzend zum Rechnerbetrieb bietet der HLRN den Rahmen für einen Kompetenzverbund für wissenschaftliches Rechnen. In diesem Verbund arbeiten Forscher sowohl aus den Anwendungswissenschaften Physik, Chemie, Erdsystemforschung und Ingenieurwissenschaften, als auch aus den Methodenwissenschaften Mathematik und Informatik. Neben dem ZIB ist das Regionale Rechenzentrum für Niedersachsen in Hannover der zweite Betreiberstandort für den HLRN-Supercomputer.

SYSTEMARCHITEKTUR DES HLRN-II

Seit 2008 ist die zweite Generation des HLRN-Supercomputers, der HLRN-II, in Betrieb. Seine Systemarchitektur spiegelt die besonderen Anforderungen der Wissenschaftler im norddeutschen Bereich wider. Als Hauptkomponente steht ein massiv-paralleler Hochleistungsrechner mit Infiniband-Netzwerk für Programme mit mehreren tausend parallelen Prozessen zur Verfügung. Daneben existieren kleinere Teilsysteme für Programme, die bei moderater Parallelität einen großen gemeinsamen Haupt-



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das ZIB betreibt gemeinsam mit dem Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen das verteilte Hochleistungsrechnersystem des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen. Die Endausbaustufe des HLRN-II-Rechners wurde im Jahr 2010 erreicht. Seitdem steht der HLRN-II sowohl für hochparallele Anwendungen als auch für moderat parallele Anwendungen mit sehr großen Hauptspeicheranforderungen von bis zu 2 TB zur Verfügung.

speicher benötigen. Die Technik des HLRN-II-Systems wurde von der Supercomputerfirma SGI geliefert und besteht aus zwei identischen Installationen an den Standorten Berlin und Hannover. In der ersten Ausbaustufe wurden pro Standort 48 Knoten vom Typ XE sowie 320 Knoten vom Typ ICE aufgestellt. In der zweiten Ausbaustufe, die im Jahr 2010 abgeschlossen wurde, kamen fünf Systeme vom Typ Ultra-Vi-

olet und weitere 960 Knoten vom Typ ICE dazu. Moderat parallele Anwendung können damit bis zu 2 TByte Hauptspeicher pro Einzelprozess adressieren. Hochparallele Anwendungen können sogar über bis zu 7680 Rechenkerne verfügen, die über MPI Daten austauschen können. Die Kenndaten des HLRN-II-Gesamtsystems Berlin+Hannover sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

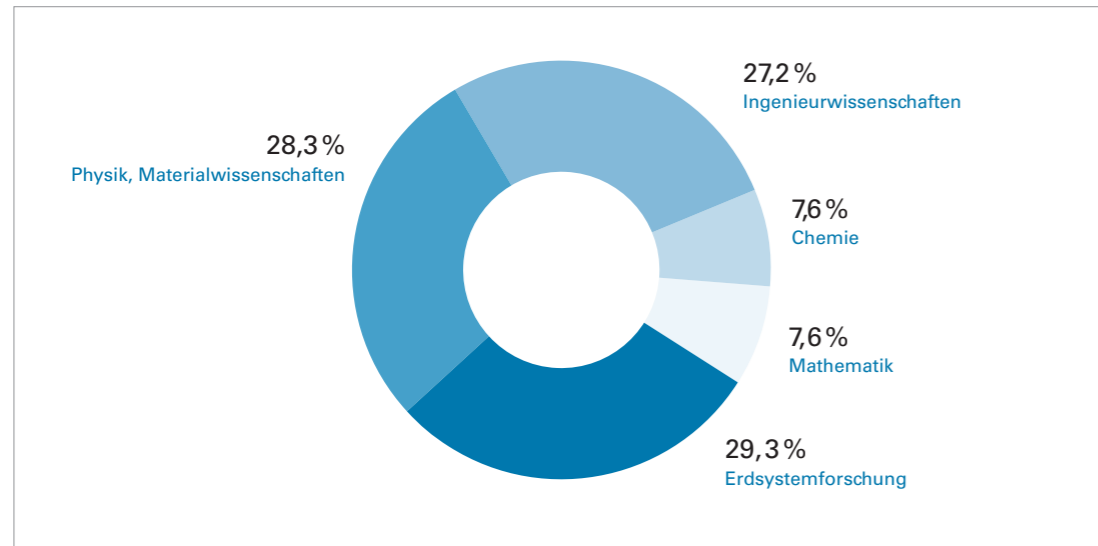
Kenndaten des HLRN-II-Gesamtsystems Berlin+Hannover.

	ICE1	XE	ICE2	UV
Prozessor, Intel Xeon	Harpertown QuadCore	Harpertown QuadCore	Nehalem EP QuadCore	Nehalem EX OctoCore
Anzahl Racks	10	6	30	10
Anzahl Nodes (Blades)	640	96	1.920	304
Anzahl Cores	5.120	768	15.360	4.864
Maximalzahl Cores pro Anwendung	2.560	384	7.680	496
Maximalzahl Cores pro Linux-Instanz	8	8	8	496
Taktrate (GHz)	3,0	3,0	2,93	2,266
Hauptspeicher/Node	16 GB	64 GB	48 GB	64 GB
Taktrate des Speichers (GHz)	1,6	1,6	1,333	1,066
Speicherzugriff, 8 (16) threads (GB/s)	15,5	15,5	38	29,6 (41,2)
Maximaler Speicher pro Anwendung	5,12 TB	3,0 TB	46 TB	1,94 TB
Maximaler Speicher pro Linux-Instanz	16 GB	64 GB	48 GB	2.048 GB
Gesamter Hauptspeicher	10,24 TB	6,0 TB	92TB	19,0 TB
Performance (TFlop/s)	61,4	9,2	180	44
Peakperformance pro NPL ((GFlops/s)h)	288	288	141	145
Speicherleistung pro NPL ((GB/s)h)	46,5	46,5	57	41,2
Kommunikationsnetzwerk	InfiniBand 4 x DDR	InfiniBand 4 x DDR	InfiniBand Dual Rail 4 x DDR	Numalink 5
MPI-Kommunik., Latenzzeit	2,5 µs	2,5 µs	3,3 µs	2,0 µs
u. Bandbreite	1,9 GB/s	1,9 GB/s	2,8 GB/ss	3,1 GB/s s
Gesamtleistung (kNPL/Jahr)	1.844	276	11.060	2.626
Relative Gesamtleistung	12 %	2 %	70 %	16 %

¹ www.hlrn.de

HLRN-FACHBERATUNG

Bearbeitet von: Hubert Busch, Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Isaac Hailperin, Bernd Kallies, Detlef Kehl, Matthias Läuter, Christian Schimmel, Frank Schmitz, Manfred Stolle, Hinnerk Stüben, Thomas Steinke, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny
Weitere Informationen unter: www.zib.de/HPC und www.hlrn.de



Die Modellierung und Simulation von Vorgängen in Natur und Technik ist in zahlreichen naturwissenschaftlichen Forschungsgebieten als gleichberechtigte tragende Säule neben der Theoriebildung und der Durchführung von Experimenten etabliert. Damit ermöglicht das wissenschaftliche Hochleistungsrechnen aber auch Validierungsmöglichkeiten im Wechselspiel zwischen Experiment und Simulation. Das ZIB stellt für Wissenschaft und Forschung den Berliner Komplex des HLRN-Supercomputers zur Verfügung. Die Nutzer kommen aus den Fachgebieten Chemie, Erdsystemforschung, Ingenieurwissenschaften, Mathematik und Physik (siehe Abbildung). Den größten Rechenzeitverbrauch haben Projekte aus den Fachgebieten Physik, Erdsystemforschung und Ingenieurwissenschaften. Die Physik umfasst hierbei sowohl klassische Physikanwendungen wie z.B. Vielteilchenmodelle, Quantendynamik und Astrophysik als auch Anwendungen der Materialwissenschaften, die im Grenzge-

biet zur Chemie liegen. Die im norddeutschen Raum prominent vertretene Erdsystemforschung reicht von der Ozeanografie über die Klimamodellierung bis hin zur Meteorologie. Die Ingenieurwissenschaften realisieren hauptsächlich Strömungssimulationen (z.B. von Schiffs- und Flugzeugprofilen), bei denen moderne Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Codes Verwendung finden. Im Fachgebiet Mathematik sind Algorithmen der kombinatorischen Optimierung, Graphalgorithmen sowie methodenwissenschaftliche Codes zusammengefasst.

HLRN-FACHBERATUNG

Als Teil des HLRN-Kompetenznetzwerks stehen für die Nutzerbetreuung sowohl eine Rechneradministrationsgruppe mit langjähriger Erfahrung als auch wissenschaftliche Fachberater aus den Anwendungsgebieten zur Verfügung. Heutige Hochleistungsrechner besitzen, verglichen mit früheren Rechnern, eine weitaus

◀ Rechenzeitverbrauch 2011 der Fachgebiete auf dem HLRN-Supercomputer.

Das Profil des HLRN

Die Fachgebiete der HLRN-Nutzerschaft.

Die Fachberatung als Teil des HLRN-Kompetenznetzwerks.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das ZIB ist seit den achtziger Jahren des vorigen Jahrhunderts Zentrum für Supercomputing in Deutschland. Seit dem Jahr 2002 betreibt das ZIB seine Supercomputer im Rahmen des HLRN-Verbundes. In den Supercomputing-Aktivitäten spielt die Fachberatung eine zentrale Rolle. Die Beratung erstreckt sich auf alle Fragen der Rechnernutzung mit Schwerpunkten in Portierung, Parallelisierung, Optimierung von Programmcodes, effizienter Datenhaltung sowie der Aus- und Weiterbildung der Nutzer.

Competence at Work



Vortrag und Betreuung der Programmierübungen im Kurs „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“

komplexere Systemarchitektur mit hunderttausenden von Rechenkernen, einem schnellen Kommunikationsnetzwerk und einem ausgewogen konfigurierten System für parallele Ein- und Ausgabe. Für die Supercomputer-Nutzer wird es daher immer schwieriger, ihre Programmcodes, die ihrerseits auch immer komplexer werden, stets an den neuesten Stand der Hardware und Systemsoftware anzupassen. Unterstützt werden sie dabei in erster Linie durch die Fachberater, wissenschaftliche Berater aus dem jeweiligen Anwendungsgebiet oder aus einem verwandten Fach. Die Fachberatung umfasst die Mitarbeit in Forschungsvorhaben, die Diskussion geeigneter Algorithmen und die Mithilfe bei der effizienten Nutzung des Rechnersystems. Weiter werden den Nutzern die technischen Möglichkeiten, die organisatorischen und fachlichen Belange der Systemnutzung und Möglichkeiten der Systemoptimierung erklärt.

Dabei spielen auch immer die größeren Datenmengen eine zunehmend wichtige Rolle. Deren Erzeugung, Verarbeitung, Haltung und langfristige Speicherung erfordern oft einen beträchtlichen Aufwand und Zeitanteil im Arbeitsablauf der Projekte. Dies wird vereinzelt sogar zum limitierenden Faktor im Bestreben, Simulationsmodelle immer detaillierter und genauer zu gestalten, da die erzeugten Datenmengen nicht mehr handhabbar, also in angemessener Zeit auswertbar, sind. Der Beratungsbedarf der Projekte in Bezug auf Datenhaltung und Datenverarbeitung hat daher zugenommen und wird weiter steigen. Zum anderen besteht bei der Ein-/Ausgabe vielfach noch ein bedeutendes unentdecktes Optimierungspotential. Dieses zu erkennen und Möglichkeiten zu seiner Aus-

schöpfung mit den Nutzern und Projekten zu diskutieren und umzusetzen ist ebenfalls eine wichtige Aufgabe der Fachberatung.

Die Fachberater decken die Forschungsschwerpunkte im HLRN ab, realisieren Anwendungen auf dem Supercomputer, publizieren in wissenschaftlichen Zeitschriften, geben regelmäßig Kurse (z.B. zur Einzelprozessor-Optimierung und zur parallelen Programmierung mit MPI und OpenMP), Workshops und Lehrveranstaltungen und beteiligen sich an Forschungsprojekten, die dem wissenschaftlichen Austausch und der Überführung neuester HPC-Software-methodik in Anwendungsgebiete dienen. Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten sind eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung der Projekte.

Für den Kompetenzverbund koordiniert das ZIB, unterstützt durch das RRZN in Hannover, den HLRN-Support und führt regelmäßige Treffen zur gegenseitigen Information und Weiterbildung der Fachberater und Anwenderbetreuer aus den Universitätsrechenzentren der am HLRN beteiligten Länder durch. Die Fachberater-Workshops finden zweimal im Jahr an unterschiedlichen Orten im HLRN-Gebiet statt und werden jeweils von einem dort ansässigen HLRN-Berater organisiert. Ein wichtiges Thema der vergangenen beiden Treffen in Hannover und Berlin war die Vorbereitung der Ausschreibung des Nachfolgesystems HLRN-III. Diskutiert wurden von den etwa zwanzig Teilnehmern u.a. die Software-Anforderungen aus Nutzersicht sowie die Anforderungen an ausschreibungsrelevante Anwendercodes als Bestandteil der Benchmarksuite.

BRAIN – DAS BERLINER WISSENSCHAFTSNETZ

Bearbeitet von: Ursula Droebes, Marek Fröhlich, Frank Schmitz, Stefan Wollny
 Weitere Informationen unter: www.zib.de/brain und www.brain.de



BRAIN ist das leistungsstarke Breitbandnetz für alle aus öffentlichen Mitteln geförderten Wissenschafts-, Kultur- und Bildungseinrichtungen in Berlin/Potsdam. Technische Voraussetzung für die Teilnahme am BRAIN ist die Erschließung der Standorte durch Glasfasern des Landes Berlin. Unabhängig von der übrigen Nutzung des Landesnetzes durch die Berliner Verwaltungen steht BRAIN ein Kontingent von 2.000 km Einzelfasern zur Verfügung. Die Vergabe und der Betrieb dieser Fasern des Glasfasernetzes wird von BRAIN selbständig koordiniert. Engpässe in dem seit 2005 bereits ausgeschöpften Kontingent werden mittels WDM¹-Technik aufgelöst. Durch Ausnutzung der besonderen Eigenschaften des Lichtes werden mehrere logisch unabhängige Übertra-

gungskanäle (sog. Bandbreiten) parallel über eine physikalische Faser übertragen. Grundsätzlich können einzelne Standorte einer Einrichtung über dedizierte Glasfasern oder Bandbreiten direkt miteinander verbunden werden. In der Regel nutzen die Einrichtungen jedoch inzwischen verstärkt die Dienste des Verbundnetzes in Ethernet-Technik, da dieses nicht nur den Datenaustausch der Standorte derselben Einrichtung ermöglicht, sondern auch den Datentransfer zwischen verschiedenen Einrichtungen.

VERBUNDNETZ

Das Verbundnetz besteht aus einem ringförmigen Kernnetz mit zusätzlichen Querverbindungen und den Zugangsleitungen für die

TEILNEHMENDE EINRICHTUNGEN

AIP | BAM | BBWA | BBB | BHT
 Charité | DAI | DFG | DFN |
 DHM | DHZB | DIPF | DIW | DK
 | ESCPEAP | FIRST | FOKUS |
 FMP | FUB | FVB | GWZ | HTW |
 HUB | HWR | HZB | IZW | ITDZ |
 MBI | MPG | PTB | SPK | SPSG |
 TUB | UdK | UP | WIAS | WissF |
 WiKo | WISTA | WZB | ZIB | ZLB

BRAIN verbindet derzeit 42 Einrichtungen mit mehr als 150 Standorten, welche einen oder mehrere BRAIN-Dienste nutzen.

BRAIN-DIENSTE

Glasfasern/Bandbreiten

- zur direkten Verbindung zweier Standorte und/oder
- zur physikalischen Anbindung an das Internet über den DFN-Verein (Regelanschluss²)

Verbundnetz

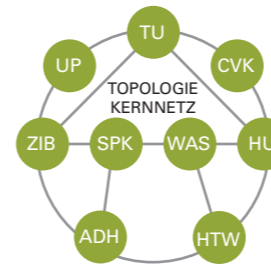
- mit Einzelanschlüssen bis zu 10.000 Mbit/s
- für leistungsstarke Verbindungen der Einrichtungen oder einzelner Standorte miteinander für direkten IP-Datenaustausch
- als Zugangsportal zum Intranet des Landes Berlin (Berliner Landesnetz BeLa)
- als Zuleitung zum Internet via Portanschluss³ über den DFN-Verein



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Seit 1994 ist BRAIN das Hochgeschwindigkeitsdatennetz für Hochschulen, Forschungsinstitute, Bildungs- sowie andere öffentliche Einrichtungen in Berlin. Grundlage ist das landeseigene Glasfasernetz, das in enger Zusammenarbeit mit dem IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ) zur gemeinsamen Nutzung von Wissenschaft und Verwaltung stetig weiter ausgebaut wird. BRAIN nutzt hiervon 2.000 km Einzelfaser und bietet regionalen Wissenschaftseinrichtungen leistungsstarke Kommunikationsverbindungen untereinander, Zugang zum Berliner Landesnetz (BeLa) und die Anbindung an das Internet über das Deutsche Forschungsnetz (DFN).

VERBUNDNETZ

- 9 BRAIN-Netzknoten
- Netlron MLX an Wissenschaftsstandorten
- 28 Teilnehmer aus Berlin/Potsdam
- 69 angeschlossene Standorte
- ca. 2,1 PetaByte akkumuliertes Datenaufkommen an Teilnehmer-Ports in 2011



NETIRON MLX

- non-blocking 400Gbps Switching-Kapazität
- Wire-speed Dual Stack für IPv4/IPv6
- MPLS⁴
- Quality of Service/Class of Service für Datenflusspriorisierung
- umfangreicher BGP-4-Support für Internet-Routing

MESSTECHNIK

Für die Fehlersuche in Glasfasernetzen setzen wir OTDR⁵- und optische Pegelmessgeräte⁶ ein.

Einrichtungen, die über Ethernet angebunden sind. Das Kernnetz wird aufgespannt durch neun über Berlin und Potsdam verteilt aufgestellte Netzknoten der Firma Brocade vom Typ Netlron MLX. Die Kernnetzstrecken sind in 10-Gigabit-Ethernet-Technik realisiert und haben eine Gesamtlänge von 268 km. Jeder Kernnetz-knoten ist mit zwei bis vier anderen verbunden; dies sorgt für hohe Redundanz im Leitungsnetz, so dass der normale Betrieb während einer Leitungsunterbrechung an einer beliebigen Stelle im Kernnetz gesichert ist. Die Kernnetzstrecken basieren auf von BRAIN betriebenen WDM-Strecken. Der aktuelle Status kann über das Internet unter www.brain.de/manage eingesehen werden. Das Management erfolgt zentral von der BRAIN-Geschäftsstelle im ZIB.

MANAGEMENT UND SERVICE

Zum Tagesgeschäft der BRAIN-Mitarbeiter gehören neben Konfiguration, Betrieb und Überwachung der Netztechnik auch die Beratung von Teilnehmern in allen Fragen der Anbin-



dung von Standorten an das BRAIN, z.B. die Planung neuer Glasfaserstrecken, Beratung bei der Konfiguration der Anwengergeräte und die Unterstützung der Anwender im Störfall. Die Fehleranalyse im Glasfasernetz wird mit eigens dafür beschafftem Messequipment selbst durchgeführt. Soweit wie möglich erfolgt die Fehlerbeseitigung durch BRAIN-Mitarbeiter, andernfalls auch durch beauftragte Dritte.

AUSBLICK

Im Jahr 2012 werden erneut zahlreiche Baumaßnahmen zur Erschließung weiterer Standorte von BRAIN-Teilnehmern durchgeführt. Um eine Anbindung auch bei schwierigen baulichen Gegebenheiten zu realisieren, plant BRAIN durch den Einsatz von sog. Free-Space-Optic⁷-Systemen die technischen Möglichkeiten und Grenzen im Rahmen eines Pilotprojektes zu evaluieren. Desweiteren plant BRAIN den Aufbau einer IPv6-Infrastruktur als Testumgebung für seine Teilnehmer zur Unterstützung bei der künftigen Migration der Einrichtungen von IPv4 zu IPv6.



¹ WDM: Wavelength Division Multiplexing ermöglicht den zeitgleichen Transport vieler Datenströme (bis zu 40 Gbit/s) durch Nutzung unterschiedlicher Wellenlängen in einem optischen Leiter (Glasfaser). ² Regelanschluss: Der DFN-Verein ist für die Bereitstellung des physikalischen Anschlusses einer Einrichtung (Zuleitung) zur Nutzung des DFN-Internet-Dienstes zuständig. ³ Portanschluss: Bei dieser Art des DFN-Internet-Zugangs (<= 100 Mbit/s) muss die nutzende Einrichtung die Zuleitung zum nächsten DFN-Router selbst stellen. Das Verbundnetz kann hierfür als Zuleitung zum DFN-Netzknoten im ZIB genutzt werden.

⁴ MPLS: Multi-Protokoll Label Switching wird genutzt für Virtual Leased Line (VLL), Virtual Private LAN Service (VPLS), BGP MPLS/VPN, Multi-VRF, FastReroute

⁵ OTDR: Optical-Time-Domain-Reflectometry, optische Zeitbereichsreflektometrie, Verfahren zur Analyse von Lichtsignalen ⁶ Pegelmessgerät: Mit einem Pegelmessgerät wird die Intensität des aus einer Glasfaser austretenden Lichts erfasst – der gemessene Pegel gibt Aufschluss über die Stärke einer Signalquelle bzw. die Qualität der Glasfaserbindung. ⁷ Free-Space-Optic: Laserbasierte Optische Freiraumübertragung

European Large Tape
User Group



IT-SERVICE

IT-Planung



Technik



Data Center and Storage Summits



Langzeitarchivierung mit Bandrobotern

Server, Datenhaltung und
Compute-Cluster

Oracle Center of Excellence Data
and Storage Management

Projekte mit Datenhaltung

Energieeffizienz

Beschaffungen



Kooperation mit Herstellern



IP-, FC- und TK-Netze



Ausbildung

IT-SERVICE

Leitung: Wolfgang Pyszkalski

Eine Darstellung aller Aktivitäten der Abteilung befindet sich unter: <http://its.zib.de>



Die Abteilung IT-Service plant, beschafft, installiert und wartet die gesamte IT-Infrastruktur im ZIB. Durch die enge Kooperation mit führenden Herstellern besitzt die Abteilung Zugriff auf neueste Produkte und kann diese teilweise bereits vor der Markteinführung unter praxisnahen Bedingungen evaluieren. Die Ergebnisse kommen nicht nur den Herstellern zugute, sondern dienen auch der Planung zukünftiger Erweiterungen der IT-Infrastruktur am ZIB, das dadurch häufig eine Vorreiterrolle bei der Einführung neuer Technologien spielt. Unsere aktuellen Erkenntnisse bringen wir zeitnah in die Lehre ein. In Zusammenarbeit mit der Hochschule für Wirtschaft und Recht in Berlin (HWR) bieten wir Ausbildungsplätze für die Fachrichtung Informatik mit dem Vertiefungsschwerpunkt Systemadministration an. Das erworbene Wissen vermitteln wir auch in unseren Veranstaltungen. Um die Förderung des Austausches zwischen den IT-Diensten wissenschaftlicher Einrichtungen bemüht, organisieren wir als Plattform für diesen Zweck regelmäßig gut besuchte Veranstaltungen, bei

denen jeweils etwa die Hälfte der Zeit für Gastvorträge anderer wissenschaftlicher Einrichtungen vorgesehen wird.

ENERGIEEFFIZIENZ

Umweltbewusstsein, leider aber auch steigende Energiekosten, machen Aktivitäten des effizienten Umganges mit Energie immer dringlicher. Grundlage für solche Maßnahmen ist eine zuverlässige Erhebung von Daten des Verbrauches über die Zeit, um den Wirkungsgrad von getroffenen Maßnahmen beurteilen zu können. Aus der Fülle der von IT-Service angebotenen Dienste sind in diesem Jahr besonders die Aktivitäten in Bezug auf Messungen des Stromverbrauches und von Umweltbedingungen hervorzuheben. Die Angaben der Hersteller von IT-Geräten zu Verbrauchswerten sind nur bedingt verwendbar. Die Daten auf den Netzteilen und in den Datenblättern stellen Maximalwerte oder pauschale Mittelwerte dar. Immer mehr Hersteller bieten auch Software zur Berechnung des Stromverbrauches auf der Basis einer gewählten Systemkonfiguration an.

Unser IP-Datennetz stellt mit 1.602 Gigabit Ethernet Ports in den Netzkomponenten für jeden Arbeitsplatz im ZIB die erforderliche Zahl von Anschlüssen mit der Geschwindigkeit von einem Gigabit zur Verfügung. Im Bereich der Server und Außenanbindungen stehen im Netz Anschlüsse mit einer Geschwindigkeit von 10 Gigabit/s über OM3-Lichtwellenleiter zur Verfügung. Zwei Switche mit 88 Ports vom Typ 10 GE FCoE und 24 Fibre Channel Ports verbinden das IP-Netz mit dem Fibre Channel Speichernetzwerk (SAN).

Über das Speichernetzwerk mit seinen 576 Ports sind derzeit 36 Server mit 1.766 Platten in 17 Arrays verbunden. Einige der Server, die Plattenkapazität über IP-Protokolle bereitstellen, sind über das Speichernetzwerk zusätzlich mit den Bänderrobotern verbunden, die mit 44 Laufwerken auf Magnetbandkassetten in 18.000 Stellplätzen zugreifen.



DIE ABTEILUNG IT-SERVICE plant, beschafft, installiert und wartet die gesamte IT-Infrastruktur im ZIB. Durch die enge Kooperation mit führenden Herstellern, insbesondere mit den Firmen Oracle und NetApp, ist die Abteilung in der Lage, neueste Produkte teilweise bereits im Prototypstadium unter praxisnahen Bedingungen am ZIB zu testen und so zur Verbesserung der Produkte beizutragen. Im Jahr 2008 ist die Abteilung als „Sun Center of Excellence für Daten- und Speichermanagement“ ausgezeichnet worden. Diese Form der Zusammenarbeit ist inzwischen mit Oracle erneuert worden.



Wärmeabgabe und Stromverbrauch sind neben der Frage des Umweltschutzes auch eine technisch nicht zu vernachlässigende Größe. Auch die Frage einer automatisierten Abschaltung bei andauerndem Ausfall der Stromversorgung ist bei unserer von Virtualisierung auf allen Ebenen geprägten IT diesem Grund rüsten wir unsere Systemschränke mit speziellen Stromverteilungseinheiten (PDU) aus, die sowohl Messungen, als auch Schaltvorgänge mittels eigener Software ermöglichen.

Diese Programme sind zum Teil recht gut aber statischer Natur. Der wirkliche Verbrauch hängt entscheidend von dem Grad und der Art der Nutzung ab. Wir messen jetzt kontinuierlich den Stromverbrauch aller IT-Geräte im Rechneraum in einer Form, die Aussagen über den Verbrauch einzelner Systeme oder Dienste ermöglichen. Vor dem Einsatz neuer Geräte können wir deren Energieeffizienz im Testbetrieb ermitteln und als eine der Grundlagen für eine Kaufentscheidung dokumentieren.

MESSUNG DES VERBRAUCHES

Seit einiger Zeit wurden bei uns bereits Techniken erprobt, die in diesem Jahr flächendeckend eingesetzt wurden. Die Messungen erfolgen dabei alternativ über jeweils eines von zwei Verfahren. PDUs (Einheiten zur Stromverteilung) sind in den Systemschränken eingebaut. Sie verfügen über Steckdosen zum Anschluss von Geräten. Jede einzelne Dose wird überwacht. Inline-Meter befinden sich außerhalb der Systemschränke. Sie messen den Strom auf den Zuleitungen zwischen den Unterverteilungen und den Systemschränken. Beide Systeme verfügen über Steuereinheiten, die die Messungen durchführen, die Daten aggregieren und auf Anfrage über das IP-Netz übermitteln. Die Daten werden von einem Server aus zyklisch abgerufen. Dieser Server ist mit Software versehen, die alle Daten in einer Datenbank abspeichert und die Möglichkeit der Abfrage bis hin zur grafischen Darstellung des Verbrauches über die Zeit bietet. Mit Ausnahme des Höchstleistungsrechners, der über eigene Verbrauchsmessungen verfügt, sind jetzt alle Systemschränke im Rechneraum mit solchen Vorrichtungen versorgt.

ZUSÄTZLICHE FUNKTION DES SCHALTENS

Bei den PDUs wird nicht nur jede einzelne Dose gemessen, sondern ist auch über das IP-Netz schaltbar. Mit der Kenntnis darüber, welches Netzteil auf welcher Dose angeschlossen ist, kann ein zentraler Server per Software die Geräte an- und abschalten. Den Vorteil erkennt jeder, der schon mal ein Plattenspeichersystem anschalten musste. Eine Vielzahl von Netzteilen muss dabei in einer bestimmten Reihenfolge geschaltet werden. Wird die Reihenfolge nicht eingehalten, führt dies unweigerlich zum Verlust der Daten. Solche Aufgaben per Software zu lösen erhöht die Sicherheit und bietet die Möglichkeit einer Automatisierung zum geordneten Abschalten aller Systeme bei Notfällen. Eine Folgeerscheinung ist, dass der Anschluss von Geräten an die Stromversorgung in den Systemschränken jetzt in Bezug auf Planung, Dokumentation und Funktionskontrolle die gleiche Qualität wie beim Datennetz hat. Dies erscheint zunächst als eine bürokratische Mehrbelastung, ist aber bei genauer Betrachtung ökonomisch, weil es die Sicherheit erhöht.

MESSUNG VON UMWELTBEDINGUNGEN

Sowohl die PDUs als auch die Inline-Meter bieten die zusätzliche Möglichkeit des Anschlusses von abgesetzten Sensoren zur Messung von Temperatur, Luftfeuchtigkeit, und einer Reihe weiterer Werte, die neben den Messungen des Stromes vom zentralen Server abgefragt und in seiner Datenbank abgelegt werden können. Momentan arbeiten wir am Aufbau eines Gitters von Sensoren im Doppelboden, um mit einem eigenen Programm die Verteilung der Temperatur über die Zeit grafisch animiert darzustellen. Für den Anteil der Luftkühlung unserer Klimatisierung sollen damit Erkenntnisse zur Optimierung der Klimatisierung gewonnen werden.

ZENTRALE DATENHALTUNG IM ZIB

Bearbeitet von: Wolfgang Pyszkalski, Dirk Krickel, The Anh Pham

Weitere Informationen unter: <http://its.zib.de>



Das Bild zeigt drei Bandspeichersysteme im Tresorraum für die Datenhaltung im ZIB, in denen auf Anforderung unserer Server 24 Roboterarme Magnetbandkassetten zwischen den 18.000 Stellplätzen und den 44 Bandlaufwerken transportieren.

Die Bandarchive befinden sich in einem Tresorraum, der auch extremer Hitze mehrere Stunden lang widerstehen kann, ohne dass sich im Innenbereich eine für die Magnetbänder kritische Temperatur entwickelt. Im Alarmfall wird der Tresor automatisch versiegelt und vollständig mit Löschgas geflutet.

ENERGIESPARENDE SPEICHERHIERARCHIE

Das Grundprinzip unserer zentralen Datenhaltung besteht deshalb aus einem mehrstufigen Speicherkonzept mit einem Verbund aus Platten und Bandspeicher. Die zentralen Server der Datenhaltung ermöglichen Anwendern auf verschiedenen technischen Wegen Zugriff auf zur Zeit etwa 1 Petabyte Plattenspeicher. Ohne Eingriff der Anwender werden neue Daten kontinuierlich von dem Plattenspeicher in das Bandarchiv kopiert, wobei immer zwei Kopien auf verschiedene Bänder geschrieben werden. Sobald der Platz auf dem Plattenspeicher knapp wird, erfolgt automatisch eine Löschung lange nicht benutzter Daten auf den Platten, wobei die Verwaltungsdaten erhalten bleiben. Der Nutzer hat so den Eindruck, dass alle seine jemals erzeugten Dateien auf den Platten liegen. Wenn auf eine so ausgelagerte Datei zugegriffen wird, laden die Server die entsprechenden Daten automatisch aus dem Bandarchiv auf die Platten zurück. Wenn ein Anwender eine Datei löscht, bleiben die Kopien auf Band noch einige Zeit erhalten und werden dann von den zentralen Servern auch dort gelöscht.

Die wissenschaftlichen Daten sind das wichtigste Gut im ZIB. Entsprechend hoch ist der von uns betriebene Aufwand in Bezug auf Sicherheit, Geschwindigkeit und Kapazität der zentralen Datenhaltung. Der Bedarf an Speicherkapazität wächst exponentiell, was die Strategie einer beständigen Erweiterung der Plattenkapazitäten nicht als zukunftsweisendes Konzept erscheinen lässt. Insbesondere der damit stark zunehmende Stromverbrauch setzt hier Grenzen. Dies um so mehr, als die bei weitem überwiegende Zahl der Daten nur relativ selten gelesen wird. Eine stromsparende Möglichkeit zur Speicherung selten benutzter Daten ist die Ablage auf Magnetbändern. Strom wird immer nur dann verbraucht, wenn Daten gelesen oder neu geschrieben werden. Dieses Verfahren ist nicht nur kostengünstig, sondern stellt auch einen schonenden Umgang mit der Umwelt dar. Um die Anwender von der Mühe des Schreibens von Daten auf Band zu befreien, haben wir ein hierarchisches Speichersystem (HSM) aufgebaut.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Für die Arbeiten im ZIB und zur Nutzung durch andere wissenschaftliche Einrichtungen betreiben wir ein modernes Speichersystem. Unsere Server ermöglichen den Zugriff auf etwa ein Petabyte Plattenspeicher. Als Erweiterung des Plattenspeichers dient ein Bandarchiv zur Langzeitspeicherung. Dieses Archiv ist ein schnelles „Hochregallager“ für Bandkassetten, die auf Anforderung der Server durch Roboter in die Bandlaufwerke geladen werden. Die Server sorgen automatisch dafür, dass sich auf dem Plattenspeicher immer die aktuell benutzten Daten befinden, wodurch er den Anwendern praktisch als unendlich groß erscheint.

Durch eine regelmäßige Nachrüstung mit neuester Technologie müssen die Daten gelegentlich auf neuere Medien migriert werden. Solche Migrationen erfolgen durch uns im laufenden Betrieb. Ein Beispiel dafür ist eine Migration von Daten, die 2009 erfolgte. Dabei wurden in nur vier Wochen 1.325 Bänder mit 300TB von SGI/DMF/Powderhorn/T9940B nach Sun/SAMFS/SL8500/T10000B migriert. Dies erforderte nicht nur ein einfaches Umkopieren, sondern auch den grundlegenden Wechsel über mehrere Technologien und Formate.

Es ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeit dieser Migration außerordentlich hoch war. Aber wir waren nicht nur schnell, sondern haben auch durch doppelte Berechnung von Prüfsummen verifiziert, dass die Daten im Ziel wirklich absolut unverändert angekommen sind.

KOOPERATIONEN MIT HERSTELLERN

Für die einzelnen Komponenten unserer Datenhaltung nutzen wir etablierte Software und Technik höchster Qualität. Durch unser Gesamtkonzept, spezielle Konfigurationen und einige Zusätze erreichen wir jedoch mehr Leistung und Sicherheit, als die einzelnen Komponenten standardmäßig bieten. Der Grad unserer Fähigkeiten spiegelt sich nicht zuletzt in dem Zustandekommen einer Kooperation unter dem Titel „Oracle Center of Excellence Daten- und Speichermanagement am Zuse-Institut Berlin“, sowie einer Reihe formloser Zusammenarbeiten zum gegenseitigen Nutzen mit weiteren Herstellern wider. Dadurch, dass uns Hersteller neueste, noch nicht auf dem Markt verfügbare Produkte und technische Dokumentationen zur Verfügung stellen, können wir Verfahren und Musterlösungen entwickeln, die einerseits die Datenhaltung im ZIB ständig verbessert, andererseits aber auch für die Hersteller und deren eigenen Entwicklungen interessant sind.

DAUERHAFT SPEICHERUNG VON DATEN

Eine zunehmende Rolle spielt die Speicherung von unwiederbringlichen Daten, wie z. B. Daten aus der Molekularbiologie, Ergebnissen von Messungen aus physikalischen Experimenten, digitalisierte archaische Artefakte und Dokumente. Für solche Daten nutzen wissenschaftliche Einrichtungen im Rahmen von Projekten unsere Infrastruktur. Dafür stellen wir ihnen auf leistungsstarken Servern virtuelle Rechner zur Verfügung, über die sie Zugriff auf Kapazitäten unserer Datenhaltung haben. Wir stellen eine bitgenaue Reproduzierbarkeit der Daten sicher, ohne uns um deren Inhalte zu kümmern. Auch ein durch die ständige Weiterentwicklung bedingter Wechsel der zu Grunde liegenden Technik und das dadurch notwendigen Migrieren von Daten erfolgt durch uns.

SCHUTZ UNWIEDERBRINGLICHER DATEN

Ein nicht zu unterschätzendes Problem bei der Lagerung von Bändern ist die Alterung des Materials. Unser Ziel ist es, sich anbahnende Probleme so frühzeitig zu erkennen, dass wir die Lesbarkeit der Daten unabhängig vom Grad der Nutzung über beliebige Zeiträume garantieren können. Dazu verfügen wir über die Möglichkeit, Probleme beim Schreiben und Lesen auf Bänder zu erkennen, die als physikalisch bedingte, normale Ereignisse immer mal wieder auftreten. Entsprechend werden solche Ereignisse im Normalfall nicht an die Server gemeldet. Gleichwohl gibt es bei Problemen mit dem Bandmaterial grenzwertige Situationen, wo eine Vielzahl solcher Ereignisse auf ein sich anbahnendes Problem hindeutet. Wirkungslos wäre diese Technik natürlich bei Bändern, die lange Zeit nicht gelesen wurden. Bänder der langfristigen Datenhaltung lesen wir deshalb außerhalb der normalen Anforderungen mittels einer speziellen Überwachung regelmäßig zur Probe. Wenn dabei die erwähnten Fehler auftreten, erfolgen entsprechende Alarmlösungen, damit wir über das weitere Vorgehen entscheiden und das Band gegebenenfalls rechtzeitig vor dem Auftreten echter Probleme umkopieren können. Da der Reinheit der Umgebung bei der Bandverarbeitung eine große Rolle zukommt, verfügt der Datenhaltungsraum über eine eigene Klimatisierung. Die Luft wird gemäß der europäischen Norm EN779 Filterklasse F7 gefiltert. Zwei voneinander unabhängige Überwachungen prüfen ständig die Temperatur und die Luftfeuchtigkeit im Raum. Bei Abweichungen vom optimalen Wert alarmieren die beiden Systeme die Haustechnik und die Abteilung IT-Service.

Weiterführende Informationen über die Aktivitäten der Abteilung IT-Service, die verwendeten Techniken, Informationen über unsere Projekte und die Mitarbeiter sind im WEB unter <http://its.zib.de> verfügbar. Dort befinden sich auch Hinweise auf Veranstaltungen, Kontaktadressen und technische Berichte über durchgeführte Arbeiten.



FAKTEN UND ZAHLEN

**MATHEMATIK UND INFORMATIK AUTHENTISCH ERLEBEN
VERANSTALTUNGEN DES ZIB FÜR KINDER, JUGENDLICHE
UND STUDIERENDE**

AUSZEICHNUNGEN UND RUF

PUBLIKATIONEN

Preprints
Mitherausgabe von Publikationen
Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden
Monographien
Habilitationen
Dissertationen
Examensarbeiten

**VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN
VON ZIB-MITARBEITERN UND -MITARBEITERINNEN**

Vorträge und Gastaufenthalte
Vorlesungen und Seminare
Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

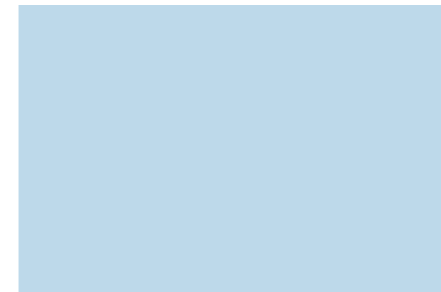
TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

Gastvorträge
Gastaufenthalte
Tagungen und Veranstaltungen

SOFTWARE UND SERVICE

WISSENSCHAFTLICHE NACHWUCHSFÖRDERUNG AM ZIB

VERANSTALTUNGEN DES ZIB FÜR KINDER, JUGENDLICHE UND STUDIERENDE



Wie in jedem Jahr haben sich die Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des ZIB auch in 2011 wieder um den wissenschaftlichen Nachwuchs gekümmert. Dem ZIB liegt am Herzen, mehr qualifizierte junge Menschen für Mathematik und Informatik zu begeistern.

Großen Zulauf erhält das Institut nicht nur in der „Langen Nacht der Wissenschaften“ und am „Girls' Day“, sondern auch bei vielen Besuchen und Führungen für Schüler und Studierende. Darüber hinaus unterstützt das ZIB Schulen mit für Wissenschaftszwecke nicht mehr benötigter Hardware und betreibt die informationstechnische Infrastruktur für den zentralen Server der Berliner Schulen.

Wir gehen selbst an Schulen und werden gerne von Schulen und Universitätskursen besucht. Im Jahr 2011 fanden 15

Veranstaltungen mit Schülerinnen und Schülern am ZIB statt, 13 Mal gingen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in Berliner und Brandenburger Schulen, um junge Menschen für die Mathematik und Informatik zu begeistern.

Zum bundesweiten „Girls' Day“ 2011 erhielten Mädchen der 5.–10. Klasse Einblicke in die am ZIB vertretenen Berufsfelder. In den angebotenen Workshops präsentierten vor allem Mitarbeiterinnen des Instituts technische Details und algorithmische Probleme im Umgang mit Computern sowie Inhalte aktueller Arbeiten. Der traditionell angebotene Workshop „Rechnerbasteln“ war wie immer der Hit.

Die Veranstaltungen des ZIB im Rahmen der „Langen Nacht der Wissenschaften“ waren mit ca. 1.700 Besuchern wie schon seit Jahren gut nachgefragt. Ne-

ben vielen Vorträgen waren die Führungen im Rechnerraum zum Hochleistungsrechner, das „Brüllballspiel“ im hauseigenen Hörsaal sowie das 3-D-Wissenschaftskino im „Studio Da Vinci“ besondere Highlights. Wie jedes Jahr hielt Horst Zuse, der älteste Sohn Konrad Zuses, Vorträge zur Geschichte des Computers und zur Arbeit seines Vaters, die auf großes Interesse stießen.

Viele der heutigen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des ZIB haben früher als Schüler Spaß am Thema über den „Mathe-Adventskalender“ gefunden, einige haben einen spannenden Vortrag über das ZIB in ihrer Schule gehört. Aus interessierten Schülerinnen und Schülern wurden begabte Studierende und später erfolgreiche Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Das ZIB durfte sie bei ihren ersten Schritten begleiten – darauf sind wir stolz.

AUSZEICHNUNGEN UND RUF

Fabio D'Andreagiovanni:

- Excellent Presentation Award of the ESF-JSPS Frontier Science Conference for Young Researchers

Ralf Borndörfer

- Listenplatz 2 für eine W2-Professur Diskrete Mathematik in den Ingenieurwissenschaften an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Armin Fügenschuh

- Listenplatz für eine W2-Professur „Angewandte Mathematik“ an der Helmut-Schmidt-Universität/Universität der Bundeswehr, Hamburg

Martin Grötschel

- Honorary Doctorate, University of Augsburg
- IBM Faculty Award
- TUM Distinguished Affiliated Professor

Olga Heismann

- Clara-von-Simson-Preis

Nam Dung Hoàng

- GOR-Dissertationspreis 2011 für seine Dissertation „Algorithmic Cost Allocation Games: Theory and Applications“

Norbert Lindow, Daniel Baum, Hans-Christian Hege

- Honorable Mention Award für die Arbeit „Voronoi-Based Extraction and Visualization of Molecular Paths“ auf der Konferenz „IEEE Visualization 2011“ in Providence, RI, USA

PUBLIKATIONEN

PREPRINTS

Der Zugriff auf die ZIB-Reports des Jahres 2011 erfolgt über den Link:

www.zib.de/de/publikationen/zib-reports2011.html

MITHERAUSGABE VON PUBLIKATIONEN

Ralf Borndörfer

- Area Coordinator, Optimization Online, Mathematical Programming Society

Peter Deuffhard

- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag
- Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications (NM-TMA), Global Science Press, Beijing
- International Journal of Computer Mathematics, Taylor & Francis, England

Martin Grötschel

- Mathematical Methods of Operations Research, Physica Verlag, (Springer-Verlag), Heidelberg
- Mathematical Programming A, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Networks, John Wiley & Sons, New York, USA
- Operations Research Letters, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Niederlande
- OR Transactions, Shanghai Scientific & Technological Publishing House, Shanghai, China
- Acta Mathematica Vietnamica, A journal published under the auspices of the Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

- Advances in Data Analysis and Classification (Theory, Methods, and Applications in Data Science), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg
- Mathematical Programming Computation, A journal of the Mathematical Programming Society, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg
- Journal of Mathematics in Industry, A new journal of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg

Thorsten Koch

- Mathematical Programming Computation, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

Alexander Reinefeld

- Journal of Grid Computing (JoGC), Kluwer Academic Publisher
- International Journal of Grid and Utility Computing (UGUC)
- International Journal of Computational Sciences (UCS)

Hans-Christian Hege

- Book series „Visualization and Mathematics“, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Video series „VideoMATH“, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- GMS Medical Informatics, Biometry and Epidemiology (MIBE)

Frank Schmitz

- Proceedings „Computational Methods in Science and Engineering“, KIT Scientific Publishing, Karlsruhe

Martin Weiser

- „Journal of Applied Mathematics“, Hindawi Publishing Corporation, Cairo, New York

BEITRÄGE IN ZEITSCHRIFTEN UND TAGUNGSBÄNDEN

1. F. Abendroth, A. Bujotzek, M. Shan, R. Haag, M. Weber, and O. Seitz.

DNA-controlled bivalent presentation of ligands for the estrogen receptor. Angew. Chem. Int. Ed., 2011.

2. D. Andrae, I. Barth, T. Bredtmann, H.-C. Hege, J. Manz, F. Marquardt, and B. Schulz. **Electronic quantum fluxes during pericyclic reactions exemplified for the cope rearrangement of semibullvalene.** J. Phys. Chem. B, 115(18):5476–5483, 2011. doi: 10.1021/jp110365g.

3. C. Auer and I. Hotz. **Complete tensor field topology on 2D triangulated manifolds embedded in 3D.** Computer Graphics Forum (EuroVis'11), 30(3): 831–840, 2011.

4. W. Bentz, K. Eckel, H. Louchet, S. Orłowski, E. Patzak, J. Seibel, A. Werner, and R. Wessälly. **Schätze heben bei der Planung von FTTx-Netzen: optimierte Nutzung von existierenden Leerrohren – eine Praxisstudie.** In: Breitbandversorgung in Deutschland, ITG-Fachbericht. VDE-Verlag, März 2011.

5. T. Berthold, S. Heinz, M. E. Pfetsch, and S. Vigerske. **Large neighborhood search beyond MIP.** In: L. D. Gaspero, A. Schaerf, and T. Stützle, editors, Proceedings of the 9th Metaheuristics International Conference (MIC 2011), pages 51–60, 2011. ISBN 978-88-900984-3-7.

6. T. Berthold, S. Heinz, and J. Schulz. **An approximative criterion for the potential of energetic reasoning.** In: A. Marchetti-Spaccamela and M. Segal, editors, Theory and Practice of Algorithms in (Computer) Systems, volume 6595 of Lecture Notes in Computer Science, pages 229–239. Springer, 2011.

7. T. Berthold, S. Heinz, and S. Vigerske. **Extending a CIP framework to solve MIQCPs.** In: J. Lee and S. Leyffer, editors, Mixed Integer Nonlinear Programming, volume 154 of The IMA Volumes in Mathematics and its Applications, pages 427–444. Springer, 2011.

8. M. Bindernagel, D. Kainmueller, H. Seim, H. Lamecker, S. Zachow, and H.-C. Hege. **An articulated statistical shape model of the human knee.** Bildverarbeitung

für die Medizin 2011, pages 59–63, 2011. doi: 10.1007/978-3-642-19335-4_14.

9. G. Birkenheuer, D. Blunk, S. Breuers, A. Brinkmann, I. dos Santos Vieira, G. Fels, S. Gesing, R. Grunzke, S. Herres-Pawlis, O. Kohlbacher, J. Krüger, U. Lang, L. Packschies, R. Müller-Pfefferkorn, P. Schäfer, H.-G. Schmalz, T. Steinke, K. Warzecha, and M. Wewior. **A molecular simulation grid as new tool for computational chemistry, biology and material science.** In: Journal of Cheminformatics 2011, volume 3 of P14, 2011. doi: 10.1186/1758-2946-3-S1-P14.

10. G. Birkenheuer, D. Blunk, S. Breuers, A. Brinkmann, G. Fels, S. Gesing, R. Grunzke, S. Herres-Pawlis, O. Kohlbacher, J. Krüger, U. Lang, L. Packschies, R. Müller-Pfefferkorn, P. Schäfer, Schuster, T. Steinke, K. Warzecha, and M. Wewior. **MoSGrid: Progress of workflow driven chemical simulations.** In: Proc. of Grid Workflow Workshop 2011, Cologne, Germany, volume 826. CEUR Workshop Proceedings, 2012.

11. A. Bley, F. D'Andreagiovanni, and A. Hanemann. **Robustness in communication networks: Scenarios and mathematical approaches.** In: Proceedings of ITG-Fachtagung „Photonische Netze“ 2011, pages 1–9. VDE Verlag, 2011.

12. B. Bodermann, E. Buhr, H.-U. Danzebrink, M. Bär, F. Scholze, M. Krumrey, M. Wurm, P. Klapetek, P.-E. Hansen, V. Korpelainen, M. van Veghel, A. Yacoot, S. Siitonen, O. E. Gawhary, S. Burger, and T. Saastamoinen. **Joint research on scatterometry and AFM wafer metrology.** AIP Conference Proceedings, 1395(1): 319–323, 2011. doi: 10.1063/1.3657910.

13. R. Borndörfer and M. Neumann. **Linienoptimierung – reif für die Praxis?** In: HEUREKA'11. FGSV Verlag, 2011.

14. R. Borndörfer, B. Erol, T. Graffagnino, T. Schlechte, and E. Swarat. **Aggregation methods for railway networks.** In: I. Hansen, E. Wendler, S. Ricci, D. Pacciarelli, G. Longo, and J. Rodriguez, editors, Proceedings of 4th International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis (IAROR), volume 4, 2011.

15. R. Borndörfer, M. Reuther, T. Schlechte, and S. Weider. **A Hypergraph Model for Railway Vehicle Rotation Planning.** In: A.

Caprara and S. Kontogiannis, editors, 11th Workshop on Algorithmic Approaches for Transportation Modelling, Optimization, and Systems, volume 20 of OpenAccess Series in Informatics (OASlcs), pages 146–155, Dagstuhl, Germany, 2011. Schloss Dagstuhl–Leibniz-Zentrum für Informatik. ISBN 978-3-939897-33-0. doi: 10.4230/OASlcs.ATMOS.2011.146.

16. E. Boyer, A. M. Bronstein, M. M. Bronstein, B. Bustos, T. Darom, R. Horaud, I. Hotz, Y. Keller, J. Keustermans, A. Kovnatsky, R. Litman, J. Reininghaus, I. Sipiran, D. Smeets, P. Suetens, D. Vandermeulen, A. Zaharescu, and V. Zobel. **SHREC 2011: robust feature detection and description benchmark.** In: Proc. Eurographics 2011 Workshop on 3D Object Retrieval (3DOR'11), pages 71–78. Eurographics Association, 2011. doi: 10.2312/3DOR/3DOR11/079-088.

17. A. Bujotzek, M. Shan, R. Haag, and M. Weber. **Towards a rational spacer design for bivalent inhibition of estrogen receptor.** J. Comput.-Aided Mol. Des., 25(3): 253–262, 2011.

18. S. Burger, J. Pomplun, F. Schmidt, and L. Zschiedrich. **Finite-element method simulations of high-Q nanocavities with 1D photonic bandgap.** In: Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XIX, volume 7933, 2011. doi: 10.1117/12.875044.

19. S. Burger, L. Zschiedrich, J. Pomplun, and F. Schmidt. **Rigorous simulations of 3D patterns on extreme ultraviolet lithography masks.** In: B. Bodermann, editor, Modelling Aspects in Optical Metrology III, volume 8083, 2011. doi: 10.1117/12.889831.

20. S. Burger, L. Zschiedrich, J. Pomplun, F. Schmidt, A. Kato, C. Laubis, and F. Scholze. **Investigation of 3D patterns on EUV masks by means of scatterometry and comparison to numerical simulations.** In: W. Maurer and F. E. Abboud, editors, Photomask Technology 2011, volume 8166, 2011. doi: 10.1117/12.896839.

21. E. Casas, A. Günther, and M. Mateos. **A paradox in the approximation of dirichlet control problems in curved domains.** SIAM J. Control Optim., 49(5): 1998–2007, 2011. doi: 10.1137/100794882.

22. F. Chabarek and U. Golas. **Interaktive Vervollständigung der szenariobasierten Spezifikation eines Parkassistenzsystems.** In: H.-U. Heiß, P. Pepper, H. Schlingloff, and J. Schneider, editors, Proceedings of GI-ASE 2011, GI-Edition LNI, 2011.

23. W. Cook and D. E. Steffy. **Solving very sparse rational systems of equations.** ACM Transactions on Mathematical Software, 37(4):39:1–39:21, 2011. ISSN 0098-3500.

24. W. J. Cook, T. Koch, D. E. Steffy, and K. Wolter. **An exact rational mixed integer programming solver.** In: IPCO 2011: Proceedings of the 15th International Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization, volume 6655 of LNCS, pages 104–116. Springer, 2011.

25. F. D'Andreagiovanni. **On improving the capacity of solving large-scale wireless network design problems by genetic algorithms.** In: C. D. C. et al., editor, Applications of Evolutionary Computation – EvoApplications 2011, volume 6625 of LNCS, pages 11–20. Springer, 2011.

26. F. D'Andreagiovanni. **Pure 0–1 programming approaches to wireless network design.** 4OR: A Quarterly Journal of Operations Research, to appear. doi: 10.1007/s10288-011-0162-z, published online: March 13, 2011.

27. F. D'Andreagiovanni, D. Bienstock, C. Mannino, and A. Sassano. **New pure 0–1 programming approaches to wireless network design.** In: Proceedings of the 2nd Nordic Workshop on System and Network Optimization for Wireless 2011, 2011.

28. F. D'Andreagiovanni, C. Mannino, and A. Sassano. **Negative cycle separation in wireless network design.** In: S. V. Julia Pahl, Torsten Reiners, editor, Network Optimization – 5th International Conference, INOC 2011, volume 6701 of LNCS, pages 51–56. Springer, 2011.

29. S. Dash, O. Günlük, and C. Raack. **A note on the MIR closure and basic relaxations of polyhedra.** Optimization Research Letters, 39(3): 198–199, May 2011.

30. V. J. Dercksen, M. Oberlaender, B. Sakmann, and H.-C. Hege. **Light microscopy-based reconstruction and interactive structural analysis of cortical neural networks.** BioVis 2011 Abstracts, 1st IEEE

Symposium on Biological Data Visualization, Oct. 2011.

31. F. Dickmann, J. Falkner, W. Gunia, J. Hampe, M. Hausmann, A. Herrmann, N. Kepper, T. A. Knoch, S. Lauterbach, J. Lippert, K. Peter, E. Schmitt, U. Schwarzmann, J. Solodenko, D. Sommerfeld, T. Steinke, A. Weisbecker, and U. Sax. **Solutions for biomedical grid computing – Case studies from the D-Grid project Services@MediGRID.** Journal of Computational Science, No. 0, 2011. ISSN 1877-7503. doi: 10.1016/j.jocs.2011.06.006.

32. V. Durmaz, M. Weber, and R. Becker. **How to simulate affinities for host-guest systems lacking binding mode information: Application in the liquid chromatographic separation of hexabromocyclododecane stereoisomers.** Journal of Molecular Modeling SIAM Multiscale Model. Simul., 2011. Online First, 12 Oktober 2011.

33. K. Ehrig, J. Goebbels, D. Meinel, O. Paetsch, S. Prohaska, and V. Zobel. **Comparison of crack detection methods for analyzing damage processes in concrete with computed tomography.** In: International Symposium on Digital Industrial Radiology and Computed Tomography, 2011.

34. R. Ehrig, M. Heller, S. Kratzenstein, G. Duda, A. Trepczynski, and W. Taylor. **The SCoRE residual: A quality index to assess the accuracy of joint estimations.** Journal of Biomechanics, 44: 1400–4, 2011.

35. H. Enke, M. Steinmetz, H.-M. Adorf, A. Beck-Ratzka, F. Breitling, T. Brüsemeister, A. Carlson, T. Ensslin, M. Höggqvist, I. Nickelt, T. Radke, A. Reinefeld, A. Reiser, T. Scholl, R. Spurzem, J. Steinacker, W. Voges, J. Wambsganß, and S. White. **AstroGrid-D: Grid technology for astronomical science.** New Astronomy, Vol. 16, No. 2, pp. 79–93, 2011. ISSN 1384-1076. doi: 10.1016/j.newast.2010.07.005.

36. K. Fackeldey. **Multiscale methods in time and space.** In: M. Günther, A. Bartel, M. Brunk, S. Schöps, and M. Striebel, editors, Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2010, pages 619–626, 2011.

37. K. Fackeldey. **Coupling meshbased and meshfree methods by a transfer operator approach.** IJPAM, 69(2): 185–202, 2011.

38. K. Fackeldey, D. Krause, R. Krause, and C. Lenzen. **Coupling molecular dynamics and continua with weak constraints.** SIAM Multiscale Model. Simul., 9: 1459–1494, 2011.

39. K. Fackeldey, S. Röblitz, O. Scharikoi, and M. Weber. **Soft versus hard metastable conformations in molecular simulations.** In: E. Onate and D. Owen, editors, Particle Methods II Fundamentals and Applications, Proceedings of the International Conference on Particle Based Methods (PARTICLES 2011), pages 899–909, 2011.

40. A. Fügenschuh, B. Hiller, J. Humpola, T. Koch, T. Lehmann, R. Schwarz, J. Schweiger, and J. Szabó. **Gas network topology optimization for upcoming market requirements.** In: IEEE Proceedings of the Conference Proceedings of the 8th International Conference on the European Energy Market 2011 (EEM11), pages 346–351, 2011.

41. Ö. Defterli, A. Fügenschuh, G.-W. Weber. **Modern Tools for the Time-Discrete Dynamics and Optimization of Gene-Environment Networks,** Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulations, Band 16, Nr. 2, Seite 4768–4779.

42. A. Fügenschuh. **A Set Partitioning Reformulation of a School Bus Scheduling Problem,** Journal of Scheduling, Band 14, Nr. 4, Seite 307–318.

43. A. Fügenschuh, P. Gausemeier, R. McFarland, G. Seliger. **Future Studies for Reuse using Mathematical Optimization of the Scenario Technique,** Advances in Sustainable Manufacturing, Proceedings of the 8th Global Conference on Sustainable Manufacturing, G. Seliger, M. M. K. Khraisheh and I. S. Jawahir, Seite 215–221.

44. R. Borndörfer, A. Fügenschuh, T. Klug, T. Schlechte. **Freight Train Routing,** 2nd International Conference on Models and Technologies for Intelligent Transportation Systems, June 22–24, 2011, Leuven, Belgium.

45. A. Fügenschuh, P. Gausemeier, R. McFarland, G. Seliger. **A Mathematical Approach for the Analysis of Energy Scenarios for Production in India,** Proceedings of the International Conference on Micro Perspectives for Decentralized Energy Supply, April 7-8, 2011, Berlin, M. Schäfer, N. Kebir, D. Philipps (Hrsg.), Seite 162–172.

46. S. Gesing, R. Grunzke, A. Balasko, G. Birkenheuer, D. Blunk, S. Breuers, A. Brinkmann, G. Fels, S. Herres-Pawlis, P. Kacsuk, M. Kozlovsky, J. Krüger, L. Packschies, P. Schäfer, B. Schuller, J. Schuster, T. Steinke, A. S. Fabri, M. Wewior, R. Müller-Pfefferkorn, and O. Kohlbacher. **Granular security for a science gateway in structural bioinformatics.** In: Proc. IWSG-Life 2011.

47. S. Gesing, P. Kacsuk, M. Kozlovsky, G. Birkenheuer, D. Blunk, S. Breuers, A. Brinkmann, G. Fels, R. Grunzke, S. Herres-Pawlis, J. Krüger, L. Packschies, R. Müller-Pfefferkorn, P. Schäfer, T. Steinke, A. S. Fabri, K. Warzecha, M. Wewior, and O. Kohlbacher. **A science gateway for molecular simulations.** In: EGI (European Grid Infrastructure) User Forum 2011, Book of Abstracts, page 94–95, 2011. ISBN 978 90 816927 1 7.

48. S. Gesing, S. Herres-Pawlis, G. Birkenheuer, A. Brinkmann, R. Grunzke, P. Kacsuk, O. Kohlbacher, M. Kozlovsky, J. Krüger, R. Müller-Pfefferkorn, P. Schäfer, and T. Steinke. **The MoSGrid community – from national to international scale.** In: EGI Community Forum 2012, 2012.

49. U. Golas, E. Biermann, H. Ehrig, and C. Ermel. **A visual interpreter semantics for statecharts based on amalgamated graph transformation.** ECEASST, Vol. 39, pp. 1–24, 2011.

50. U. Golas, H. Ehrig, and F. Hermann. **Formal specification of model transformations by triple graph grammars with application Conditions.** ECEASST, Vol. 39, pp. 1–26, 2011.

51. U. Golas, K. Hoffmann, H. Ehrig, A. Rein, and J. Padberg. **Functorial analysis of algebraic higher-order net systems with applications to mobile ad-hoc networks.** ECEASST, Vol. 40, pp. 1–20, 2011.

52. U. Golas, L. Lambers, H. Ehrig, and F. Orejas. **Attributed graph transformation with inheritance: Efficient conflict detection and local confluence analysis using abstract critical pairs.** Theoretical Computer Science, 424: 46–68, 2012. doi: 10.1016/j.tcs.2012.01.032.

53. M. Goldau, A. Wiebel, N. S. Gorbach, C. Melzer, M. Hlawitschka, G. Scheuermann, and M. Tittgemeyer. **Fiber stippling: An illustrative rendering for probabilistic diffusion tractography combinatorial vector**

field topology in 3 dimensions. In: 1st IEEE Symposium on Biological Data Visualization, pages 23–30, 2011. doi: 10.1109/Bio-Vis.2011.6094044.

54. M. Grötschel. **Mathematik, Politik und Recht.** Leopoldina Jahrbuch 2010, Nationale Akademie der Wissenschaften, Verlagsgesellschaft Stuttgart, 2011, 433–455.

55. A. Günther and M. Hinze. **Elliptic control problems with gradient constraints – variational discrete versus piecewise constant controls.** Comput. Optim. Appl., 49(3): 549–566, 2011. doi: 10.1007/s10589-009-9308-8.

56. A. Günther, H. Lamecker, and M. Weiser. **Direct LDDMM of discrete currents with adaptive finite elements.** In: X. Pennec, S. Joshi, and M. Nielsen, editors, Proceedings of the Third International Workshop on Mathematical Foundations of Computational Anatomy – Geometrical and Statistical Methods for Modelling Biological Shape Variability, pages 1–14, 2011.

57. D. Günther, J. Reininghaus, H. Wagner, and I. Hotz. **Memory-efficient computation of persistent homology for 3D images using discrete morse theory.** Proc. Sibgrapi – Conference on Graphics, Patterns and Images, 2011.

58. D. Günther, J. Reininghaus, S. Prohaska, T. Weinkauff, and H.-C. Hege. **Efficient computation of a hierarchy of discrete 3D gradient vector fields.** In: R. Peikert, H. Hauser, and H. Carr, editors, Topological Methods in Data Analysis and Visualization II, Mathematics and Visualization, pages 15–29. Springer, 2012. doi: 10.1007/978-3-642-23175-9_2.

59. H.-C. Hege, J. Kasten, and I. Hotz. **Distillation and visualization of spatiotemporal structures in turbulent flow fields.** J. Phys.: Conf. Ser., 318:062009, 2011. doi: 10.1088/1742-6596/318/6/062009.

60. H.-C. Hege, M. Koppitz, F. Marquardt, C. McDonald, and C. Mielack. **Visual analysis of quantum physics data.** Quantum Dynamic Imaging, pages 71–87, August 2011. doi: 10.1007/978-1-4419-9491-2_6.

61. S. Heinz and J. C. Beck. **Solving resource allocation/scheduling problems with constraint integer programming.** In: M. A. Salido, R. Barták, and N. Policella, editors, Proceedings of the Workshop on Constraint Satisfaction Techniques for

Planning and Scheduling Problems (COPLAS 2011), pages 23–30, 2011.

62. S. Heinz and J. Schulz. **Explanations for the cumulative constraint: An experimental study.** In: P. M. Pardalos and S. Rebennack, editors, Experimental Algorithms, volume 6630 of Lecture Notes in Computer Science, pages 400–409. Springer, 2011.

63. S. Heinz, T. Schlechte, R. Stephan, and M. Winkler. **Solving steel mill slab design problems.** Constraints, 17: 39–50, 2012. doi: 10.1007/s10601-011-9113-8.

64. M. Heller, S. Kratzenstein, R. Ehrig, G. Wassilew, G. Duda, and W. Taylor. **The weighted optimal common shape technique improves identification of the hip joint centre of rotation in vivo.** Journal of Orthopedic Research, 29:1470–5, 2011.

65. M. Herschel, F. Naumann, S. Szott, and M. Tauber. **Scalable iterative graph duplicate detection.** IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 99, 2011. doi: 10.1109/TKDE.2011.99.

66. B. Hiller and T. Vredeveld. **Probabilistic alternatives for competitive analysis.** Computer Science – Research and Development, 2011. doi: 10.1007/s00450-011-0149-1.

67. U. Homberg, D. Baum, and S. Prohaska. **Describing and analyzing the dual structures of porous media.** In: F. Mücklich, P. Slussallek, and K. Schladitz, editors, Proc. 3D-Microstructure Meeting, pages 24–25, 2011.

68. F. Idzikowski, S. Orłowski, C. Raack, H. Woessner, and A. Wolisz. **Dynamic routing at different layers in IP-over-WDM networks – maximizing energy savings.** Optical Switching and Networking, Special Issue on Green Communications, 8 (3): 181–200, 2011.

69. S. P. Jorra and Maik. **Latency-optimal walks in replicated and partitioned graphs.** In: J. Xu, G. Yu, S. Zhou, and R. Unland, editors, Database Systems for Advanced Applications, Vol. 6637, pages 14–27. Springer, Berlin, Heidelberg, 2011

70. M. Kahnt, F. Galloway, H. Seim, H. Lamecker, M. Taylor, and S. Zachow. **Robust and Intuitive Meshing of Bone-Implant Compounds.** In: CURAC, pages 71–74, Magdeburg, 15.–16. September 2011.

71. J. Kasten, I. Hotz, and H.-C. Hege. **On the elusive concept of Lagrangian coherent structures.** In: R. Peikert, H. Hauser, and H. Carr, editors, Topological Methods in Data Analysis and Visualization II, Mathematics and Visualization, pages 207–220. Springer, 2011.

72. J. Kasten, J. Reininghaus, I. Hotz, and H.-C. Hege. **Two-dimensional time dependent vortex regions based on the acceleration magnitude.** IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 17(12): 2080–2087, 2011.

73. B. Kettner and F. Schmidt. **The pole condition as transparent boundary condition for resonance problems: detection of spurious modes.** In: Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XIX, volume 7933, 2011. doi: 10.1117/12.874752.

74. C. Klapproth, A. Schiela, and P. Deuffhard. **Adaptive timestep control for the contact-stabilized Newmark method.** Numer. Math., 119(1): 49–81, 2011.

75. B. H. Kleemann, J. Kurz, J. Hetzler, J. Pomplun, S. Burger, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Fast online inverse scattering with Reduced Basis Method (RBM) for a 3D phase grating with specific line roughness.** In: B. Bodermann, editor, Modelling Aspects in Optical Metrology III, volume 8083, 2011. doi: 10.1117/12.889364.

76. D. Kleinfeld, A. Bharioke, P. Blinder, D. D. Bock, K. L. Briggman, D. B. Chklovskii, W. Denk, M. Helmstaedter, J. P. Kaufhold, W.-C. A. Lee, H. S. Meyer, K. D. Micheva, M. Oberlaender, S. Prohaska, R. C. Reid, S. J. Smith, S. Takemura, P. S. Tsai, and B. Sakmann. **Largescale automated histology in the pursuit of connectomes.** Journal of Neuroscience, 31(45):16125–16138, 2011. doi: 10.1523/JNEUROSCI.4077-11.2011.

77. M. Klimm, A. Bujotzek, and M. Weber. **Direct reweighting strategies in conformation dynamics.** MATCH Commun. Math. Comp. Chem., 65(2): 333–346, 2011.

78. T. Koch, T. Achterberg, E. Andersen, O. Bastert, T. Berthold, R. Bixby, E. Danna, G. Gamrath, A. Gleixner, S. Heinz, A. Lodi, H. Mittelman, T. Ralphs, D. Salvagin, D. Steffy, and K. Wolter. **MIPLIB 2010.** Mathematical Programming Computation, 3: 103–163, 2011. ISSN 1867-2949. doi: 10.1007/s12532-011-0025-9.

79. B. Kolbeck, M. Höggqvist, J. Stender, and F. Hupfeld. **Please – Lease coordination without a lock server.** Parallel and Distributed Processing Symposium, International, Vol. 0, pp. 978–988, IEEE Computer Society: Los Alamitos, Ca, USA

80. A. Kratz, M. Hadwiger, and I. Hotz. **Improved visual exploration and hybrid rendering of stress tensor fields via shape-space clustering.** Poster presentation at the IEEE VisWeek 2011, Providence.

81. A. Kratz, N. Kettlitz, and I. Hotz. **Particle-based anisotropic sampling for two-dimensional tensor field visualization.** In: Vision Modeling and Visualization (VMV'11), pages 145–152. Eurographics Association, 2011.

82. A. Kratz, B. Meyer, and I. Hotz. **A Visual Approach to Analysis of Stress Tensor Fields.** In: H. Hagen, editor, Scientific Visualization: Interactions, Features, Metaphors, volume 2 of Dagstuhl Follow-Ups, pages 188–211. Schloss Dagstuhl–Leibniz-Zentrum fuer Informatik, Dagstuhl, Germany, 2011. ISBN 978-3-939897-26-2. doi: 10.4230/DFU.Vol 2. SciViz.2011.188.

83. S. Kratzenstein, E. Kornaropoulos, R. Ehrig, M. Heller, G. Duda, F. Plank, and W. Taylor. **Effective marker placement for identification of the centre of rotation at the hip.** Gait & Posture, 2011, accepted.

84. N. Kruber, M. Höggqvist, and T. Schütt. **The benefits of estimated global information in DHT load balancing.** IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid, Vol. 0, pp. 382–391, IEEE Computer Society: Los Alamitos, CA, USA, 2011.

85. S. Lang, V. J. Dercksen, B. Sakmann, and M. Oberlaender. **Simulation of signal flow in 3D reconstructions of an anatomically realistic neural network in rat vibrissal cortex.** Neural Networks, 24 (9): 998–1011, 2011. ISSN 0893-6080. doi: 10.1016/j.neunet.2011.06.013.

86. N. Lindow, D. Baum, and H.-C. Hege. **Voronoi-based extraction and visualization of molecular paths.** IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 17(12): 2025–2034, 2011.

87. D. Lockau, L. Zschiedrich, S. Burger, F. Schmidt, F. Ruske, and B. Rech. **Rigorous optical simulation of light management in crystalline silicon thin film solar cells with rough interface textures.** In: Physics and

Simulation of Optoelectronic Devices XIX, volume 7933, 2011. doi: 10.1117/12.874967.

88. A. Martin, B. Geißler, C. Hayn, A. Morsi, L. Schewe, B. Hiller, J. Humpola, T. Koch, T. Lehmann, R. Schwarz, J. Schweiger, M. Pfetsch, M. Schmidt, M. Steinbach, B. Willert, and R. Schultz. **Optimierung Technischer Kapazitäten in Gasnetzen.** In: Optimierung in der Energiewirtschaft, volume 2157 of VDI-Berichte, pages 105–115. VDI-Verlag, 2011.

89. Martin Grötschel ML (Berlin). **Mathematik, Politik und Recht.** In: Jörg Hacker, Präsident der Akademie, editor, Leopoldina-Jahrbuch 2010, volume Leopoldina Reihe 3, Jahrgang 56, pages 433–445. Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina, Nationale Akademie der Wissenschaften, Halle(Saale) 2011, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart, 2011.

90. J. Maurras and R. Stephan. **On the cardinality constrained matroid polytope.** Networks, 57(3): 240–246, 2011.

91. H. N. Miyamura, S. Ohzahata, Y. Shinano, and R. Miyashiro. **Adaptive view-dependent tree graph visualization.** In: The 8th International Joint Conference on Computer Science and Software Engineering (JCSSE 2011), pages 187–192. Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), 2011.

92. Y. Neve-Oz, T. Pollok, S. Burger, M. Golosovsky, and D. Davidov. **Localized resonant states and transmission in a two-dimensional photonic quasicrystal.** In: N. Mastorakis, editor, Proc. of the 5th International Conference on Applied Mathematics, Simulation, Modelling (ASM '11), Corfu, 2011, volume 1, pages 178–182, 2011.

93. M. Oberlaender, C. P. J. de Kock, R. M. Bruno, A. Ramirez, H. S. Meyer, V. J. Dercksen, M. Helmstaedter, and B. Sakmann. **Cell type-specific threedimensional structure of thalamocortical circuits in a column of rat vibrissal cortex.** Cerebral Cortex, 2011. doi: doi:10.1093/cercor/bhr317.

94. K. Oberleithner, M. Sieber, C. N. Nayeri, C. O. Paschereit, C. Petz, H.-C. Hege, B. R. Noack, and I. J. Wygnanski. **Three-dimensional coherent structures of the swirling jet undergoing vortex breakdown: Stability analysis and empirical mode construction.** J. Fluid Mech., 679: 383–414, 2011. doi: 10.1017/jfm. 2011.141.

95. K. Peter. **Reliability study of coding schemes for wide-area distributed storage systems.** In: PDP 2011: The 19th Euro-micro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Computing. Euromicro, Feb. 2011.

96. C. Petz, K. Oberleithner, M. Sieber, C. N. Nayeri, O. Paschereit, I. J. W. Wygnanski, B. R. Noack, and H.-C. Hege. **Global modes in a swirling jet undergoing vortex breakdown.** Physics of Fluids, 23: 091102, 2011. doi: 10.1063/1.3640007.

97. J. Pomplun, S. Burger, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Reduced basis method for real-time inverse scatterometry.** In: B. Bodermann, editor, Modelling Aspects in Optical Metrology III, volume 8083, 2011. doi: 10.1117/12.889892.

98. K. Pöthkow and H.-C. Hege. **Positional uncertainty of isocontours: Condition analysis and probabilistic measures.** IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 17(10): 1393–1406, 2011. ISSN 1077-2626. doi: 10.1109/TVCG.2010.247.

99. K. Pöthkow, B. Weber, and H.-C. Hege. **Probabilistic marching cubes.** Computer Graphics Forum, 30(3): 931–940, 2011. doi: 10.1111/j.1467-8659.2011.01942.x.

100. C. Raack, A. M. C. A. Koster, S. Orłowski, and R. Wessälly. **On cut-based inequalities for capacitated network design polyhedra.** Networks, 57(2): 141–156, Mar. 2011.

101. J. Reininghaus, N. Kotava, D. Günther, J. Kasten, H. Hagen, and I. Hotz. **A scale space based persistence measure for critical points in 2D scalar fields.** Visualization and Computer Graphics, IEEE Transactions on, 17(12), December 2011.

102. A. Rigort, D. Günther, R. Hegerl, D. Baum, B. Weber, S. Prohaska, O. Medalia, W. Baumeister, and H.-C. Hege. **Automated segmentation of electron tomograms for a quantitative description of actin filament networks.** Journal of Structural Biology, 177: 135–144, January 2012. doi: 10.1016/j.jsb.2011.08.012.

103. S. Saevarsson, G. Sharma, S. Montgomery, K. Ho, H. Ramm, R. Lieck, S. Zachow, and C. Anglin. **Kinematic comparison between gender specific and traditional femoral implants.** In: Proceedings of the 11th Alberta Biomed-

ical Engineering (BME) Conference (Poster), page 80, 2011.

104. G. Sagnol. **A class of semidefinite programs with rank-one solutions.** Linear Algebra and its Applications, 435 (6): 1446–1463, 2011. doi: 10.1016/j.laa.2011.03.027.

105. C. Scheibe, A. Bujotzek, J. Darnedde, M. Weber, and O. Seitz. **DNA-programmed spatial screening of carbohydrate-lectin interactions.** Chem. Sci., 2: 770–775, 2011.

106. A. Schiela and A. Günther. **An interior point algorithm with inexact step computation in function space for state constrained optimal control.** Numer. Math., 119(2): 373–407, 2011. doi: 10.1007/s00211-011-0381-4.

107. T. Schlechte. **Railway track allocation – simulation and optimization.** In: I. Hansen, E. Wendler, S. Ricci, D. Pacciarelli, G. Longo, and J. Rodriguez, editors, Proceedings of 4th International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis (IAROR), volume 4, 2011.

108. T. Schlechte, R. Borndörfer, B. Erol, T. Graffagnino, and E. Swarat. **Micromacro transformation of railway networks.** Journal of Rail Transport Planning & Management, 1(1): 38–48, 2011.

109. F. Schlosser, M. Schoth, S. Burger, F. Schmidt, A. Knorr, S. Mukamel, and M. Richter. **Ultrafast nonlinear spectroscopy with spatially confined fields.** AIP Conference Proceedings, 1398(1): 94–96, 2011. doi: 10.1063/1.3644223.

110. F. Schmidt, J. Pomplun, L. Zschiedrich, and S. Burger. **Fast online simulation of 3D nanophotonic structures by the reduced basis method.** In: Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies XV, volume 7941, 2011. doi: 10.1117/12.874726.

111. T. Schütt, A. Reinefeld, and R. Maier. **MR-search: massively parallel heuristic search.** Concurrency and Computation: Practice and Experience, 2011. ISSN 1532-0634. doi: 10.1002/cpe.1833.

112. M. Shan, A. Bujotzek, F. Abendroth, O. Seitz, M. Weber, and R. Haag. **Conformational analysis of bivalent estrogen receptor-ligands: from intramolecular to intermolecular binding.** ChemBioChem, 12(17): 2587–2598, 2011.

113. T. Soboll and U. Golas. **A Local-Global Model for Multiagent Systems – Sheaves on the Category MAS.** In: J. Filipe and A. Fred, editors, Proceedings of ICAART 2012, volume 2, pages 331–334. SciTePress, 2012.

114. T. Sontheimer, E. Rudigier-Voigt, M. Bockmeyer, D. Lockau, C. Klimm, C. Becker, and B. Rech. **Light harvesting architectures for electron beam evaporated solid phase crystallized si thin film solar cells: Statistical and periodic approaches.** Journal of Non-Crystalline Solids, 2011.

115. W. Taylor, E. Kornaropoulos, S. Kratzstein, R. Ehrig, F. Plank, and M. Heller. **Targeted marker placement for the functional identification of the hip joint centre.** In: Transactions Vol. 36, 2011 Annual Meeting of the Orthopedic Society, Long Beach, 2011.

116. W. Taylor, B. Pöplau, C. König, R. Ehrig, S. Zachow, G. Duda, and M. Heller. **The medial-lateral force distribution in the ovine stifle joint during gait.** Journal of Orthopedic Research, 29: 567–71, 2011.

117. L. M. Torres, R. Torres, R. Borndörfer, and M. E. Pfetsch. **Line planning on paths and tree networks with applications to the Quito Trolebús System.** Int. Trans. Oper. Res., 18: 455–472, 2011. doi: 10.1111/j.1475-3995.2010.00802.x.

118. J. von Berg, J. Dworzak, T. Klinder, D. Manke, H. Lamecker, S. Zachow, and C. Lorenz. **Temporal subtraction of chest radiographs compensating pose differences, 2011.** accepted for publication.

119. B. Weber, G. Greenan, S. Prohaska, D. Baum, H.-C. Hege, T. Müller-Reichert, A. A. Hyman, and J.-M. Verbavatz. **Automated tracing of microtubules in electron tomograms of plastic embedded samples of caenorhabditis elegans embryos.** Journal of Structural Biology, 2011. ISSN 1047-8477. doi: 10.1016/j.jsb.2011.12.004. in press, available online 13 December 2011.

120. B. Weber, M. Möller, J.-M. Verbavatz, D. Baum, H.-C. Hege, and S. Prohaska. **Fast tracing of microtubule centerlines in electron tomograms.** BioVis 2011 Abstracts, 1st IEEE Symposium on Biological Data Visualization, Oct. 2011.

121. M. Weber, A. Bujotzek, K. Andrae, M. Weinhardt, and R. Haag. **Computational**

entropy estimation of linear polyether modified surfaces and correlation with protein resistant properties of such surfaces. J. Mol. Sim., 2011.

122. A. Werner. **Kombinatorische Optimierung und die 40-Punkte-Regel.** Mitteilungen der DMV, 19: 153–157, 2011.

123. A. Werner and R. F. Wotzlaw. **On linkages in polytope graphs.** Adv. Geom., 11(3): 411–427, 2011. doi: 10.1515/ADVGEOM.2011.015.

124. A. Wiebel, H.-C. Hege, M. L. W. Ziech, M. W. A. Caan, J. Stoker, and F. M. Vos. **DCE-MRI-oriented volume rendering for monitoring of Crohn’s disease.** BioVis 2011 Abstracts, 1st IEEE Symposium on Biological Data Visualization, Oct. 2011.

125. A. Wiebel, S. Koch, and G. Scheuermann. **Glyphs for non-linear vector field singularities.** In: R. Peikert, H. Hauser, H. Carr, and R. Fuchs, editors, Topological Methods in Data Analysis and Visualization II, Mathematics and Visualization, pages 177–190. Springer, Berlin, 2011.

126. G. K. L. Wong, M. S. Kang, H. W. Lee, S. Burger, L. Zschiedrich, F. Biancalana, and P. S. J. Russell. **Strongly twisted solid-core PCF: A one-dimensional chiral metamaterial.** In: Frontiers in Optics, 2011.

127. J. Zhao, B. Frank, S. Burger, and H. Giessen. **Large-area highquality plasmonic oligomers fabricated by angle-controlled colloidal nanolithography.** ACS Nano, 5 (11), 2011. doi: 10.1021/nn203177s.

128. V. Zobel, J. Reininghaus, and I. Hotz. **Generalized heat kernel signature.** Journal of WSCG, International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision, pages 93–100, 2011.

MONOGRAPHIEN

1. P. Deuffhard and M. Weiser. **Numerische Mathematik 3 – Adaptive Lösung partieller Differentialgleichungen.** de Gruyter, 2011.

2. C. Marksches, I. Reichle, J. Brüning, and P. Deuffhard, editors. **Atlas der Weltbilder.** Oldenbourg Akademieverlag, 2011.

HABILITATIONEN

Freie Universität Berlin

Marcus Weber

(Numerische Analysis und Modellierung)

A Subspace Approach to Markov State Models via a New Infinitesimal Generator
Gutachter: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Armin Fügenschuh

(Abt. Optimierung)

Computational Aspects of Time in Scheduling and Dynamic Flow Problems
Gutachter: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB), Horst Hamacher (TU Kaiserslautern), Thomas Lieblich (EPFL Lausanne, Schweiz), Martin Skutella (TU Berlin)

DISSERTATIONEN

Freie Universität Berlin

Corinna Klapproth

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Adaptive Numerical Integration of Dynamical Contact Problems
Betreuer/Gutachter: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Carlos Henrique Cardonha

(Abt. Optimierung)

Applied Methods for the Vehicle Positioning Problem
Betreuer: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Thomas Schlechte

(Abt. Optimierung)

Railway Track Allocation: Models and Algorithms
Betreuer: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

EXAMENSARBEITEN

Freie Universität Berlin

Johannes Bondzio

(Abt. Numerische Mathematik)

Goal-oriented error estimation and an adapted cost functional on a numerical simulation of facial implants
Betreuer: Martin Weiser (ZIB)

Michelle Retzlaff

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Brushing and Linking Methods by the Example of Tensor Visualization
Gutachter: Helmut Alt, Ingrid Hotz und Andrea Kratz (FU Berlin und ZIB)

Sebastian Schuberth

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

High-Performance Tomographic Reconstruction using OpenCL
Gutachter: Konrad Polthier, Hans-Christian Hege und Steffen Prohaska (FU Berlin und ZIB)

Antonia Wittmers

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Ein Werkzeug zur Erzeugung konsistenter Netze auf triangulierten Oberflächen
Gutachter: Konrad Polthier, Ingrid Hotz, Hans Lamecker und Stefan Zachow (FU Berlin und ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Michael Berlin

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Popularitätsbasierte Anpassung des Replikationsfaktors in verteilten Dateisystemen
Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Sebastian Borchert

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Generische Templates zur Kommunikation in heterogenen Manycore-Systemen
Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Marianne Krabi

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Implementierung einer Methode zur automatischen Erkennung von Nervenzellkörpern in 3D Mikroskopbildern
Gutachter: Beate Meffer, Hans-Christian Hege und Vincent Dercksen (HU Berlin und ZIB)

Maik Lange

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Redundanzverwaltung in konsistenten verteilten Datenbanken
Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Robert Maier

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Massiv-parallele Suche und effiziente Heuristiken

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Bert Münnich

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Kürzeste-Wege-Suche mit Grafikkarten

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Gerd Wittchen

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Network Coding zur ausfalltoleranten**Speicherung im Vergleich**

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Technische Universität Berlin**Tsima Friedrich Bolik**

(Abt. Optimierung)

Polyedrische Approximation von Punktwolken am Beispiel der Kennfelder von Verdichtern

Gutachter: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Daniel Fajardo

(Studiengang Global Production and Engineering GPE),

Development and Test of a Linear Program in Order to Implement an Efficient Make-to-Forecast Production Strategy

Gutachter: Armin Fügenschuh (ZIB)

Dariusz Gigloo(Studiengang Global Production and Engineering GPE) **Freight Train Routing**

Gutachter: Armin Fügenschuh (ZIB)

Christoph Hansknecht

(Abt. Optimierung)

Valid Cuts for Mixed-Integer Programming

Gutachter: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Gregor Hendel

(Abt. Optimierung)

New Rounding and Propagation Heuristics for Mixed Integer ProgrammingGutachter: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB) und Ralf Borndörfer (ZIB),
Betreuer: Timo Berthold (ZIB)**Kai Hennig**

(Abt. Optimierung)

Sensor networks: Localizing nodes from noisy data

Gutachter: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Wei Huang**Operative Planning of Water Supply Networks by Mixed Integer Nonlinear Programming**

Gutachter: Martin Grötschel (TU Berlin) und Günter Rote (FU Berlin),

Betreuer: Ambros Gleixner (ZIB)

Nino Kettlitz

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Anisotropes Sampling in der Tensorfeld-visualisierung

Gutachter: Olaf Hellwich und Ingrid Hotz und Andrea Kratz (TU Berlin und ZIB)

Lars Lubkoll

(Abt. Numerische Mathematik)

Optimal Control in Implant Shape Design

Gutachter: Anton Schiela (TU Berlin und ZIB)

Maria Maximova

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Formal Relationship between Petri Net and Graph Transformation Systems based on Functors between M-adhesive Categories

Zweitgutachter: Ulrike Golas (ZIB)

Felix Simon

(Abt. Optimierung)

Postoptimierung bei der Planung von FTTx-Netzen

Gutachter: Martin Grötschel und Axel Werner (TU Berlin und ZIB)

Université Libre de Bruxelles**Maximilien Renard**

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Generation of Regional Intensity Models to Improve Atlas-based Automatic Segmentation

Gutachter: Nadine Warzée, Stefan Zachow, Hans Lamecker und Martin Grewe (Universität zu Lübeck und ZIB)

Technische Universität Darmstadt**Stefanie Roos**

(Fachbereich Mathematik)

Analysis of Routing on Sparse Small-World Topologies

Gutachter: Thorsten Strufe (TU Darmstadt) und Ralf Borndörfer (TU Darmstadt und ZIB)

Bianca Winter

(Fachbereich Mathematik)

Mathematische Optimierungsverfahren für die Konferenzplanung

Gutachter: Ralf Borndörfer und Stefan Ulbrich (TU Darmstadt) (TU Darmstadt und ZIB)

Universität zu Lübeck**Judith Berger**

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Nichtlineare Registrierung zur Segmentierung des Musculus gluteusmedius in CT-Daten

Gutachter: Bernd Fischer, Nils Papenberg, Hans Lamecker und Dagmar Kainmüller (Universität zu Lübeck und ZIB)

Hochschule Mittweida**Erik Mucha**

(Abt. Optimierung)

Graphenaggregation: Numerische Optimierungsverfahren zur approximativen Komplexitätsreduktion in GasnetzmodellenGutachter: Peter Tittmann (Hochschule Mittweida),
Betreuer: Armin Fügenschuh (ZIB), Benjamin Hiller (ZIB)**Universität Potsdam****Paul Seidel**

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Interaktive Visualisierung und Filterung großer Volumendaten mittels Volumenrendering

Gutachter: Jürgen Döllner, Steffen Prohaska (Universität Potsdam und ZIB)

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN UND -MITARBEITERINNEN**VORTRÄGE UND GASTAUFENTHALTE****Fabio D’Andreagiovanni**

25.03.2011

New Pure 0–1 Programming approaches to wireless network design

The 2nd Nordic Workshop on System and Network Optimization for Wireless, SNOW 2011, Stöten, Sweden

28.04.2011

On Improving the Capacity of Solving Large-scale Wireless Network Design Problems by Genetic Algorithms

5th International Conference on Network Optimization, INOC2011, Hamburg

07.05.2011

On the design of efficient algorithms for Survivable Multi-layer Networks

2nd ROBUKOM Workshop, TU Berlin, Berlin

15.06.2011

Negative Cycle Separation in Wireless Network Design

EvoStar 2011, Torino, Italy

07.11.2011

On the design of efficient algorithms for Survivable Multi-layer Networks

3rd ROBUKOM Workshop, TU Chemnitz, Chemnitz

Cornelia Auer

02.06.2011

Complete Tensor Field Topology on 2D Triangulated Manifolds embedded in 3D

EuroVis 2011, Bergen, Norwegen

Daniel Baum

04.05.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

Maxnet Co Ltd, Tokio, Japan und Visage Imaging GmbH, Berlin

21.04.2011

Fast Segmentation of Microtubules in Electron Tomograms

Minisymposium on Centrosomes (organisiert von Anthony Hyman (MPI-CBG Dresden)), Großbothen

23.11.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

Maxnet Co Ltd, Tokio, Japan und Visage Imaging GmbH, Berlin

Wolfgang Baumann

02.02.2011

HLRN – High Performance Computing in Norddeutschland

Besuch von Studenten der TU Berlin im ZIB (Vortrag und Führung)

11.07.2011

HLRN – High Performance Computing in Norddeutschland

Besuch von Studenten der HTW Berlin im ZIB (Vortrag und Führung)

08.11.2011

Computer-Simulationen auf Hoch und Höchstleistungsrechnern

ZEDAT, FU Berlin

30.11.2011

Seminar „Aktuelle Entwicklungen im Bereich des Mobile Computing“

HTW Berlin

Michael Berlin

16.05.2011

XtreemFS – a distributed and replicated cloud file system

DESY Computing Seminar über Datenverarbeitung in der Hochenergiephysik, Hamburg

Timo Berthold

02.03.2011

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

TU Berlin, Berlin

22.03.2011

Sudoku vs. Graphenfärbung: Wenn alles verschieden sein muss

Urania, Berlin

07.05.2011

Mathematics of Discrete Optimization

MATHEON/BMS Young Researchers Week-end, Blossin

21.06.2011

SCIP development

Google Meeting, Paris, France

04.07.2011

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

Airbus, Hamburg

22.07.2011

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats, ZIB, Berlin

25.07.2011

Large Neighborhood Search beyond MIP

MIC 2011 Conference, Udine, Italy

19.08.2011

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

Sino-German Workshop, ZIB, Berlin

02.09.2011

Rounding and Propagation Heuristics for MIP

OR 2011, Zurich, Switzerland

15.09.2011

SCIP now and then

IBBM/ZIB Optimization Workshop, ZIB, Berlin

21.09.2011

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

Procom-ZIB Optimization Workshop, ZIB, Berlin

17.02.2011

Grid generation and CAD techniques for 3D electromagnetic field computations

4th Annual Meeting Photonic Devices, ZIB

04.07.2011

Modeling of complex 3D Metamaterials using Computer Aided Design techniques

7th Workshop on Numerical Methods for Optical Nano Structures, ETH Zurich, Switzerland

13.12.2011

Back-reflector optimization in thinfilm silicon solar cells using 3D finite element simulations (Poster)

Next Generation Solar Energy, Erlangen

Matthias Bindernagel

21.03.2011

An Articulated Statistical Shape Model of the Human Knee

Tagung Bildverarbeitung für die Medizin, Lübeck

Ralf Borndörfer

27.01.2011

Mathematische Optimierung im öffentlichen Verkehr

Workshop Methodenkompetenz, IVU

Traffic Technologies AG, Berlin

17.02.2011

Optimierung des Linienplans 2010 in Potsdam

Sitzung der GOR AG Logistik und Verkehr,

Berliner Verkehrsbetriebe (BVG), Berlin

15.03.2011

Wochenschemaoptimierung

User Forum 2011, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

16.03.2011

Linienoptimierung – reif für die Praxis?

Heureka’11: Optimierung in Verkehr und Transport, Stuttgart

11.05.2011

Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung für die DB Fernverkehr AG

Workshop, DB Fernverkehr AG, Frankfurt am Main

24.06.2011

Scheduling Problems and Algorithms in Traffic and Transport

10th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems (MAPSP 2011), Nymburk, Tschechien

28.06.2011

Wochenschemaoptimierung

7. Psyru Anwendentagung, DB Stadtverkehr GmbH, Fulda

02.07.2011

Railway Optimization

1. Jahreskongress der Jungen Deutschen Physikalischen Gesellschaft (jDPG), Wolfsburg

06.07.2011

Kalendertagsgenaue Planung

Workshop, DB Fernverkehr AG, Frankfurt am Main

08.07.2011

Railway Optimization

Bewerbungsvortrag, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

22.07.2011

Die Abteilung Optimierung des Zuse-Instituts Berlin

Workshop, Airbus Operations GmbH, Hamburg

16.08.2011

Railway Optimization and Integer Programming

Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods, and Applications in Industry and Management, ZIB, Berlin

02.09.2011

The Steiner Connectivity Problem

Operations Research 2011 (OR 2011), ETH Zürich, Schweiz

16.09.2011

Personaleinsatzplanung

Workshop, DB Systel AG, Frankfurt am Main

27.09.2011

Umlaufoptimierung

IVU User Group Optimierung, Regionalbus Oberlausitz GmbH, Bautzen

28.09.2011

Wochenschemaoptimierung

IVU User Group Optimierung, Regionalbus Oberlausitz GmbH, Bautzen

22.11.2011

Die Abteilung Optimierung des Zuse-Instituts Berlin

Workshop mit der Bundesnetzagentur, ZIB, Berlin

Alexander Bujotzek

21.09.2011

Computational studies on multivalent ligand-receptor interactions

2. Doktoranden-Workshop des SFB 765-Graduiertenkollegs, Rheinsberg

Sven Burger

24.01.2011

Finite Element Methods for Optical Near Field Simulations

Presentation at Nikon Precision Inc., Belmont, CA, USA

25.01.2011

FEM solver for 3D numerical simulations of integrated optical devices

SPIE Photonics West/Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XIX, San Francisco, CA, USA

13.04.2011

FEM simulations of plasmonic devices

Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Braunschweig

20.05.2011

Finite element method simulations of plasmonic devices and materials

Second International Workshop on Non-linear Nanostructures for Ultrafast Laser Applications, Max-Born-Institut, Berlin

24.05.2011

Rigorous simulations of 3D patterns on extreme ultraviolet lithography masks

SPIE Modeling Aspects in Optical Metrology III, München

21.09.2011

Investigation of 3D patterns on EUV masks by means of scatterometry and comparison to numerical simulations

SPIE Photomask Technology, Monterey, CA, USA

23.09.2011

FEM solver for rigorous electromagnetic field simulations

Presentation at KLA-Tencor, San Jose, CA, USA

28.10.2011

Investigation of 3D patterns on EUV masks (invited)

262. PTB Seminar: EUV Metrology, Berlin

Steffi Conrad-Rempel

05.05.2011

Mein OPUS4 – Möglichkeiten zur Konfiguration und Anpassung

OPUS4-Workshop, ZIB, Berlin

05.05.2011

Von OPUS3 nach OPUS4 – Migrationsplanung im KOBV

OPUS4-Workshop, ZIB, Berlin

Vedat Durmaz

06.04.2011

Multi-Mode Molecular Dynamics Simulation of the Chromatographic Elution Order of Hexabromocyclododecane Stereoisomers

25th MMWS Molecular Modelling Workshop, Erlangen

08.06.2011

Wir bauen uns ein Molekül – die Mathematik hilft dabei

Stall presentation and one of three finalists' talks, Wissenschaftssommer 2011, Mainz

Peter Deuffhard

14.02.2011

Alle Computer rechnen falsch – aber verschieden falsch

Tag der Wissenschaften, Friedrich-Gymnasium, Luckenwalde

01.03.2011

Neuere Resultate bei der effizienten Lösung von Diffusions-Reaktions-Systemen

Max-Planck-Institut für Dynamic komplexer technischer Systeme, Magdeburg

07.06.2011

Beutelspachers Sofa

Mathematikum Gießen

17.07.2011

Adaptive integration of dynamic contact problems

AMP 2011 – Advances in the Numerical Solution of Constrained Differential Equations, University of British Columbia, Vancouver, Canada

18.07.2011

Endocrinological Networks: From Data to Mathematical Models

Minisymposium „Modelling Aspects of Endocrine Regulation in the Female Reproductive System – Part I of II“, ICIAM 2011, Vancouver, Canada

15.09.2011

Das Lächeln der Mathematiker

MINT-MATHEathLON, TU Berlin

06.11.2011

Panel Diskussion, Chancen und Risiken des Internet

Outreach 2011, Skype, mit Hochschule Neubrandenburg

15.11.2011

Mathematik für die Krebstherapie Hyperthermie

Fakultätskolloquium, Fakultät Elektrotechnik, Informatik und Mathematik, Universität Paderborn

24.11.2011

Scientific Computing, The Hidden Key Technology

Department of Mathematical Sciences, Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST), Daejeon, Korea

Konstantin Fackeldey

02.07.2011

Efficient Simulation in Protein Modelling and Non-equilibrium Processes (extended Talk)

European Conference of Mathematics and Theoretical Biology, Krakow, Polen

08.07.2011

Conformation Dynamics for Protein Folding

Fritz-Haber-Institute, Berlin

20.07.2011

Multiscale Phenomena in Molecular Simulations

International Council for Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2011), Vancouver, Canada

22.07.2011

Coupling Meshfree and Meshbased Methods for Multiscale Simulations

International Council for Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2011), Vancouver, Canada

05.10.2011

Meshfree Methods in Drug Design

Sixth International Workshop Meshfree Methods for Partial Differential Equations 2011, Bonn

26.10.2011

Soft vs Hard Metastable Conformations

Particle-Based Methods (PARTICLES 2011), Barcelona, Spain

Barbara Fichtl

13.09.2011

Für Experten und alle, die es werden wollen: Online-Recherche von Museumsobjekten

Symposium „Vom Ordnen der Dinge“, DHM, Berlin

18.10.2011

Vorstellung von GOS (gemeinsam mit Carlos Saro) Herbsttagung zur Museumsdokumentation, ZIB, Berlin**Hilde Franck**

12.09.2011

Schwarzbrot Fernleihe: Automatisierte Fernleihe und Online-Fernleihe für Endnutzer seit 2003

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

16.11.2011

Online-Fernleihe: Informationen zum aktuellen Stand der KOBV-Online-Fernleihe für Bibliotheken des VÖB

Brandenburg

BLHA, Potsdam

Armin Fügenschuh

20.01.2011

Gas Network Topology Optimization, Statusseminar FORNE, Hannover

18.02.2011

Computational Aspects of Time in Scheduling and Dynamic Flow Problems, Technische Universität Berlin, Berlin

08.04.2011

A Mathematical Approach for the Analysis of Energy Scenarios for Production in India, International Conference on Micro Perspectives for Decentralized Energy Supply, Berlin

07.05.2011

Warum spart der Staat Steuern, wenn die Schüler eine halbe Stunde früher aufstehen? – Eine Einladung zur Diskreten Optimierung, 16. Berliner Tag der Mathematik, Berlin

11.05.2011

Eingabedaten für Gasnetzoptimierung, Statusseminar FORNE, Nürnberg

26.05.2011

Gas Network Topology Optimization for Upcoming Market Requirements, 8th International Conference on the European Energy Market, Zagreb, Kroatien

31.05.2011

Gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierungsprobleme in zwei Transportanwendungen, Helmut-Schmidt-Universität – Universität der Bundeswehr, Hamburg

16.06.2011

Mixed-Integer Nonlinear Programming – Linear Approximations & Applications, DMV-SIGOPT International Conference on Optimization, Lambrecht

20.6.2011

Mathematische Optimierung – Grundlagen und Anwendungen in der Energiewirtschaft, GASAG Sommerschule, Berlin

30.08.2011

Routing Cars in Rail Freight Service, Discrete Optimization Seminar, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA, USA**Gerald Gamrath**

14.02.2011

Aktuelle Entwicklungen in SCIP SAP Projektworkshop, ZIB, Berlin

07.05.2011

Malen nach Zahlen

Ausstellungsbeitrag, Tag der Mathematik, Beuth Hochschule für Technik Berlin

22.06.2011

Dantzig-Wolfe Decomposition for MIPs

Optimization Group, Google, Paris, France

20.09.2011

Generisches Branch-Cut-and-Price DMV Studierendenkonferenz, Köln

13.11.2011

MIPLIB 2010 – features and characteristics

INFORMS Annual Meeting, Charlotte, USA

16.11.2011

The solver GCG – an easy way to use branch-and-price

INFORMS Annual Meeting, Charlotte, USA

25.01.2011

Selbstorganisierende Datenreplikation in Drahtlosen Ad-Hoc Netzwerken im Katastrophenszenario

Forschungsseminar Lehrstuhl für Rechnerorganisation und Kommunikation (Prof. Malek), HU Berlin, Berlin

Joanna Geibig

25.01.2011

Selbstorganisierende Datenreplikation in Drahtlosen Ad-Hoc Netzwerken im Katastrophenszenario

Forschungsseminar Lehrstuhl für Rechnerorganisation und Kommunikation (Prof. Malek), HU Berlin, Berlin

27.07.12

14:55

20.09.2011

Network Area Recognition in Wireless Ad-Hoc Networks

METRIK Forschungsseminar, Berlin

28.09.2011

Network Area Recognition

Forschungsseminar Parallele und Verteilte Systeme (Prof. Reinefeld), Berlin

Ambros Gleixner

24.06.2011

„What is ... linear programming?“

„What is ...?“ – Seminar der Berlin Mathematical School, Berlin

19.08.2011

Operative Planning of Water Network Design by MINLP

Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods, and Applications in Industry and Management, Berlin

31.08.2011

Operative Planning of Water Network Design by MINLP

Konferenz OR 2011, Zürich, Schweiz

14.09.2011

Tutorial „Integer Programming for Constraint Programmers“,

zusammen mit Chris Beck (University of Toronto, Canada), Timo Berthold, Stefan Heinz und Kati Wolter (ZIB)

17th International Conference on Principles and Practice of Constraint Programming, Perugia, Italien

Ulrike Golas

06.10.2011

Interaktive Vervollständigung der Szenariobasierten Spezifikation eines Parkassistenzsystems

9. GI Workshop Automotive Software Engineering, Berlin (zusammen mit Fadi Chabarek)

Julia Goltz

12.09.2011

Die große Freiheit in der Wolke?

zusammen mit Thorsten Koch

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

Sebastian Götschel

16.05.2011

Fast Defect Shape Reconstruction Based on the Travel Time in Pulse Thermography

International Symposium on Nondestructive Testing of Materials and Structures (NDTMS), Istanbul, Turkey

Carl Martin Grewe

15.09.2011

Digital morphometry: The potential of statistical shape models

Internationaler Kongress der Gesellschaft für Anthropologie (GfA), Schleswig

25.07.2011

Interpretierbare Formenmodelle durch Rotationsverfahren

Max-Planck-Institut, Tübingen

02.11.2011

Prädiktion von Merkmalen aus Formfeatures: Schätzung von Geschlecht und Alter anhand der individuellen Beckenform

Universitätsklinikum Hamburg-Eppendorf, Hamburg

Martin Grötschel

21.01.2011

Ressourcenoptimale Gestaltung von Prozessen: Mathematik im betrieblichen Einsatz

Tagung: „Obertauern Begegnungen 2011“ (19.01.–22.01.11), Obertauern

01.03.2011

Production Factor Mathematics

University of Western Australia, Perth, Australia

02.03.2011

Mathematical Aspects of Public Transport

Distinguished Lecture Series in Mathematics and Applications, University of South Australia, Mawson Lakes Campus, Australien

03.03.2011

...more maths than you think: mathematics in everyday life

Bunbury Cathedral Grammar School, Bunbury, Australien

30.03.2011

Solving linear programs

LAGOS 2011, Bariloche, Argentinien

31.03.2011

Solving mixed-integer programs

LAGOS 2011, Bariloche, Argentinien

06.04.2011

Mathematics in Public Transport: Theory and Practice

RWTH Aachen

07.04.2011

Mathematics, Operations Research, and Modern Industry

86th Meeting of the GOR-Working Group „Real World Mathematical Optimization“, Aachen

05.05.2011

Forms of Industry Collaboration: Design and Operation of Networks in Practice

7th Meeting of the MATHEON Advisory Board, Berlin

27.05.2011

LP/IP Stories

8th International Conference on Integration of Artificial Intelligence and Optimization Research Techniques in Constraint Programming for Combinatorial Optimization Problems, Berlin

06.06.2011

My Library and Me

International Library Conference „Shifting Traditions – Librarians on the Move“, Berlin

08.07.2011

Mathematik und gesellschaftliche Verantwortung

Universität Augsburg

13.07.2011

The Impact of Mathematics in Industry: Examples of Projects at ZIB and MATHEON

Workshop on „Industrial Transfer and Mathematics“, July 12–14, 2011, Santiago de Compostela, Spanien

12.09.2011

Nie aufgeben: weiter träumen!

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

12.09.2011

Copyright on mathematics and software: An academic perspective

25th IFIP TC7 Conference on System Modeling and Optimization, TU Berlin

15.09.2011

History of LP and IP

IBM/ZIB-Workshop on Optimization Software, ZIB Berlin

20.09.2011

Was ist eigentlich Mathematik?

Öffentliche Podiumsdiskussion im Rahmen der DMV-Jahrestagung, Universität Köln

Andreas Günther

16.03.2011

Optimal Current Matching for Medical Image Registration Problems

OCIP 2011, TU München, München

19.07.2011

Optimal Current Matching for Medical Image Registration Problems

ICIAM 2011, Vancouver, Canada

05.10.2011

A new numerical scheme for Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping of discrete currents with adaptive finite elements

University of British Columbia, Vancouver, Canada

15.12.2011

Revisiting the numerics for correspondence problems between geometric objects

TU Berlin, Berlin

Hans-Christian Hege

10.03.2011

Advancing Knowledge with Interactive Visualization and Analytical Reasoning (keynote lecture)

Kickoff meeting and first Open-Forum of VISIONAIR (EU FP7 project), Institut Polytechnique de Grenoble (Grenoble INP), France

15.03.2011

Visualisierung und Datenanalyse: Aktuelle und künftige Forschung am ZIB

Project Meeting of GEO-X, Working group Geoinformatics/Intelligent Data Analysis, Institute of Meteorology, Freie Universität Berlin

08.04.2011

Visualization of Fuzzy Shapes and Statistical Shape Models in Biomedical Image Segmentation (invited talk)

Dagstuhl Seminar 11142, Innovations for Shape Analysis: Models and Algorithms, Schloss Dagstuhl

06.06.2011

Uncertainty Visualization and Display of Probabilistic Isocontours (invited talk)

Dagstuhl Seminar 11231, Scientific Visualization, Schloss Dagstuhl

27.06.2011

Uncertainty: Modeling and Representation (invited talk)

Future and Emerging Technologies related to the Virtual Physiological Human (VPH-FET Conference), London, UK

24.08.2011

Visualization of Unsharp Data: Roads to Sharp Formulations (invited talk)

Seminar at TU Wien, Institut für Computergraphik und Algorithmen, Vienna, Austria

12.09.2011

Distillation and Visualization of Spatiotemporal Structures in Turbulent Flow Fields

European Turbulence Conference (ETC13), Warsaw, Poland

21.09.2011

Visualizing Quantified Uncertainty (invited talk) Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France

03.11.2011

Visual Support for 3D Microstructure Analysis: Methods and Results (keynote lecture) 3D Microstructure Meeting, Saarbrücken

24.11.2011

Light-Microscopy-based Anatomical Reconstruction, Simulation and Analysis of Cortical Neural Networks (invited talk) Workshop on Statistics and Neuroimaging 2011, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin**Stefan Heinz**

13.06.2011

Solving Resource Allocation/Scheduling Problems with Constraint Integer Programming COPLAS 2011, Freiburg

22.06.2011

The plugin based design of SCIP

Optimization Group, Google, Paris, France

14.09.2011

Integer Programming for Constraint Programmers (Tutorial)

CP 2011, Perugia, Italy

15.11.2011

Challenging and Extending Constraint-based Scheduling Techniques INFORMS 2011, Charlotte, USA**Olga Heismann**

24.05.2011

Regularity in Rolling Stock Roster Planning CPAIOR 2011, Workshop on Mathematical Optimization of Railway-Systems, Berlin

01.09.2011

Minimum Cost Hyperassignments with Applications to ICE/IC Rotation Planning

OR 2011, Zürich, Switzerland

20.09.2011

Minimum Cost Hyperassignments

DMV 2011, Studierendenkonferenz, Köln

14.11.2011

A special hypergraph minimum cut problem

Combinatorial Optimization Workshop, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Benjamin Hiller

16.02.2011

Mathematical background of the hall call destination algorithm

Technical Meeting Project Broadwalkhouse, Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH, Köln

19.08.2011

Advanced online algorithms for realworld elevator control

Sino-German Workshop, ZIB

14.09.2011

Modelling gas networks with possible extensions IFIP 2011, Berlin**Kirankumar Hiremath**

18.02.2011

Simulation of light propagation in slot microresonators: Numerical challenges and physical insights

MATHEON-Workshop „4th Annual Meeting Photonic Devices“, ZIB

04.–05.10.2011

Efficient simulation of optical dynamics in hybrid nano-structures using finite element approach

Workshop concerning theory/numerics related to the SPP 1391, Uni. Jena

30.10.–04.11.2011

Efficient simulation of optical processes in microresonators by Adaptive Finite element method

492 WE-Heraeus Seminar on „Micro and macro cavities in classical and nonclassical light“, Physikzentrum Bad Honnef

Mikael Höggqvist

März 2011

Partitioned Total Order Delivery with Routecast

Gast am SICS/CSL Seminar, Stockholm, Sweden

Ulrike Homberg

02.11.2011

Describing and Analyzing the Dual Structures of Porous Media
3D Microstructure Meeting, Saarbrücken

Ingrid Hotz

08.06.11

3D Tensor Field Exploration In Shape Space
Dagstuhl Seminar 11231, Scientific Visualization, Schloss Dagstuhl

15.06.2011

Visuelle Datenanalyse und Merkmalsextraktion in Vektor- und Tensorfeldern
Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 24.06.2011

Robust Extraction and Tracking of Flow Features

Workshop on Topology in Fluid Flow Visualization, University of Pisa, Italy 18.10.2011

Flow Feature Extraction from a Data Analysis Point of View

Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France 15.12.2011

3D Tensor Field Exploration – Finding Representative Subsets

Dagstuhl Seminar 11501, Visualization and Processing of Tensors and Higher Order Descriptors for Multi-Valued Data, Schloss Dagstuhl

Jesco Humpola

16.05.2011

Topology Planning for Natural Gas Distribution Networks
SIAM 2011, Darmstadt

24.05.2011

Topology Planning of Gas Transportation Networks by solving MINLP Programs
CPAIOR 2011, Berlin

16.06.2011

Mathematical Optimization for Extension Planning of Gas Transportation Networks
SIGOPT 2011, Lambrecht

01.07.2011

Optimierungsmethoden für Topologieplanung von Gastransportnetzwerken.
Siemens Workshop Angewandte Diskrete Optimierung SWADO 2011, Pommersfelden

02.09.2011

Mathematical Optimization for Capacity Planning of Gas Distribution Networks.
5th European Conference on Operations Research OR 2011, Zurich, Schweiz

14.09.2011

Solving MINLP Programs arising in Gas Network Extension Planning.
Conference on System Modeling and Optimization IFIP 2011, Berlin

Max Kahnt

16.09.2011

Robust and Intuitive Meshing of Bone-Implant Compounds
10. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie (CURAC), Magdeburg

Jens Kasten

05.04.2011

On the elusive concept of Lagrangian coherent structures
4th Workshop on Topology-Based Methods in Data Analysis and Visualization, ETH Zurich, Zurich, Switzerland 24.–30.04.2011

Gastaufenthalt am Institut Pprime
Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France

26.04.2011

On the extraction and filtering of Lagrangian features (invited talk)
Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France

05.–11.06.2011

Gastaufenthalt am Institut Pprime
Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France 07.06.2011

On the extraction and filtering of Lagrangian features based on the acceleration (invited talk)

Séminaires de l'Institut PPRIME, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, Poitiers, France

27.10.2011

Two-Dimensional time-dependent vortex regions based on the acceleration magnitude
IEEE VisWeek 2011, Providence, RI, USA

Benjamin Kettner

26.01.2011

The pole condition as transparent boundary condition for resonance problems: detection of spurious modes
San Francisco, Photonics West 2011 12.02.2011

The pole condition as transparent boundary condition for resonance problems: detection of spurious modes
Zuse Institute Berlin, 4th Annual Meeting Photonic Devices

Corinna Klapproth

18.03.2011

Variationelle Integratoren
Disputationsvortrag, FU Berlin/ZIB 02.06.2011

Adaptive numerical integration of dynamical contact problems
Advances in Computational Science, Universität Lugano, Schweiz

16.06.2011

Adaptive numerical integration of dynamical contact problems
ICCCM 2011, Hannover

12.12.2011

Adaptive algorithms for dynamical contact problems
Institut für Mechanik und Regelungstechnik, Universität Siegen

Torsten Klug

23.05.2011

The Freight Train Routing Problem
KOsMoS Verbundworkshop, ZIB, Berlin 24.05.2011

The Freight Train Routing Problem
Workshop on Mathematical Optimization of Railway-Systems (CPAIOR 2011), Berlin

22.06.2011

Freight Train Routing
2nd International Conference on Models and Technologies for Intelligent Transportation Systems (MT-ITS 2011), Leuven, Belgium

02.09.2011

The Freight Train Routing Problem
SOR 2011, Zurich, Switzerland 01.12.2011

Optimale Zugführung im Schienengüterverkehr
KOsMoS Verbundworkshop, TU Braunschweig

Thorsten Koch

06.01.2011 (invited)

State of the Art in Mixed Integer Programming and Extensions
Chiang Mai University International Conference 2011: on recent development in Applied and Computational Mathematics January 6–7, 2011, Chiang Mai, Thailand, 26.02.2011 (invited)

How to survive Real-World Projects as a Mathematician
Seminar on Computation and Optimization for new Extensions (SCOPE), Chuo University, Tokyo, Japan 03.03.2011 (invited)

How to survive Real-World Projects as a Mathematician
SICE, University of Miyazaki, Japan 04.03.2011 (invited)

State of the Art in Mixed Integer Programming and Extensions
Geographical Data Information – Visualization and Analysis – (GODIVA), University of Tsukuba, Japan 17.05.2011

Which Mixed Integer Programs could a million CPUs solve?

2011 SIAM Conference on Optimization, Darmstadt 25.05.2011

Which Mixed Integer Programs could a million CPUs solve?

CPAIOR, ZIB, Berlin

22.06.2011 (invited)

Which Mixed Integer Programs could a million CPUs solve?

Google, Paris, France

18.08.2011

Mathematics and Industry
Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, ZIB, Berlin 05.09.2011

Introduction to Mathematical programming

9. FORNE Status meeting, OGE, Essen

12.09.2011

In Zukunft wolzig mit Aussicht auf?

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

12.09.2011

Die große Freiheit in der Wolke?
zusammen mit Julia Goltz 9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

14.10.2011

From Simulation to Optimization
Management of Gas Networks: Mathematical Solution Technologies, Dutch Embassy, Berlin

19.10.2011

Die große Freiheit in der Wolke?
10. Fachbeiratssitzung, München

28.10.2011

Cloud Computing
KOBV-Kuratorium, ZIB, Berlin

09.11.2011 (invited)

What could a million cores do to solve Integer Programs?

INCONLA 2011 The 8th International Conference on Numerical Optimization and Numerical Linear Algebra, Xiamen, Fujian Province, China, November 7–11 15.11.2011

What could a million cores do to solve Integer Programs?

Seminar, Beijing Jiaotong University, School of Science, Department of Mathematics, Beijing, China

16.11.2011 (invited)

Discrete Optimization in the Design of Sheet Metal Products

2011 One-day Workshop on Optimization in Materials Computing Division of Mathematics and Materials/Environment Sciences, National Center for Mathematics and Interdisciplinary Sciences, CAS. ICM-SEC, AMSS, CAS, Beijing, China

Andrea Kratz

05.10.2011

Particle-Based Anisotropic Sampling for Two-Dimensional Tensor Field Visualization

16th International Workshop on Vision, Modeling and Visualization (VMV), Berlin 23.10.2011

Effective Exploratory Visualization of Three-Dimensional Symmetric Second-Order Stress Tensor Fields

Doctoral Colloquium at IEEE VisWeek

2011, Providence, RI, USA

26.10.2011

Improved Visual Exploration and Hybrid Rendering of Stress Tensor Fields via Shape-Space Clustering (Poster)
IEEE VisWeek 2011, Providence, RI, USA

Hans Lamecker

22.09.2011

Revisiting the Numerics of LDDMM
MICCAI 2011 Workshop on Mathematical Foundations of Computational Anatomy, Toronto, Canada

04.07.2011

Atlas-based 3D Image Segmentation (Poster)
VIA 2011, Symposium on Variational Image Analysis, Heidelberg

Ralf Lenz

31.08.2011

Optimization of water network operation under uncertainties
International Conference on Operations Research 2011, ETH Zurich, Switzerland

Monika Lill

12.09.2011

Migration – unser täglich Brot
9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

Norbert Lindow

27.10.2011

Voronoi-based Extraction and Visualization of Molecular Paths
IEEE VisWeek 2011, Providence, RI, USA

Stefan Lohrum

04.04.2011

Metalib Enhancement Requests
MetaLib Next Generation und die Product Working Group, DACHELA 2011, Univ. St. Gallen 09.05.2011

Implementierung konsortialer Portale mit Primo

Zentrum für Bibliotheks- und Informationswissenschaftliche Weiterbildung – Fortbildungsveranstaltung „Integrated Search“, Fachhochschule Köln

09.06.2011

Management integrierter, konsortialer Portallösungen

100. Deutscher Bibliothekartag, ZIB, Berlin

27.09.2011

Neues aus dem KOBV
SFX Anwendertreffen NRW, Fachhochschule Köln

Lars Lubkoll

26.07.2011

Optimal Control in Implant Shape Design
17th International Symposium on Computational Biomechanics, Ulm

25.11.2011

Optimal Control in Implant Shape Design

Dies Mathematicus, TU Berlin

Matthias Miltenberger

14.02.2011

SoPlex – Einführung und aktuelle**Entwicklung**

SAP Projektworkshop, ZIB, Berlin

23.02.2011

Gitorial – Einführung in Git

Abteilungsvortrag, ZIB, Berlin

22.03.2011

Sudoku vs. Graphenfärbung

MathInside (MATHEON Schülervortrag),

Urania, Berlin

15.11.2011

Large-scale LP solving

INFORMS Annual Meeting 2011, Charlotte,

USA

16.11.2011

The IDR method for sequences of linear systems

INFORMS Annual Meeting 2011, Charlotte,

USA

Olaf Paetsch

30.05.2011

3-D-Visualisierung von Radar und Ultraschallecho mit ZIBAmira (Poster)

DGZfP-Jahrestagung, Bremen

17.08.2011

Visualisierung und Datenanalyse von ZfP-Daten mit ZIBAmira

Seminar der Bundesanstalt für Material-

forschung, Berlin

Kathrin Peter

08.–11.02.2011

Reliability study of coding schemes for wide-area distributed storage systems

Parallel, Distributed, and Network-Based

Processing Conference, Ayia Napa, Zypern

01.06.2011

Data management with iRODS and Reliability of distributed data storage systems

Karlsruhe Institute of Technology (KIT),

Karlsruhe

01./02.12.2011

Consistency and fault tolerance for erasure-coded data in distributed storage systems

Diskussionskreis Fehlertoleranz, Berlin.

Wolfgang Peters-Kottig

09.06.2011

Langzeitarchivierung von Forschungsdaten als Aufgabe für Bibliotheken

100. Deutscher Bibliothekartag, ZIB, Berlin

12.09.2011

EWIG und noch mehr...

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

Christoph Petz

14.09.2011

Selected Methods for the Analysis of Hemodynamics and Morphology of Cerebral Aneurysms

Gesellschaft für Informatik – Visual

Computing in Medicine Group Meeting,

Magdeburg

Kai Pöthkow

02.06.2011

Probabilistic Marching Cubes

EuroVis 2011, Bergen, Norwegen

24.10.2011

Approximate Level-Crossing Probabilities for Interactive Visualization of Uncertain Isocontours

Working with Uncertainty, Workshop at

IEEE VisWeek 2011, Providence, RI, USA

Steffen Prohaska

17.05.2011

Visualization and Image Analysis with ZIBAmira

Invited Talk, Max Planck Florida Institute,

Jupiter, Florida, USA

April–Juni 2011

Gastaufenthalt

Digital Neuroanatomy, Max Planck Florida

Institute, Jupiter, Florida, USA

Juli–September 2011

Gastaufenthalt

Neurobiology, MRC Laboratory of Molecular

Biology, Cambridge, UK

Christian Raack

13.09.2011

Affine recourse for the robust network design problem: Between static and dynamic routing

University of Cadiz, Spain

16.11.2011

DESI Konsortialtreffen: Optimierungsstudien, Modellbildung und Daten

Deutsche Telekom Berlin

Heiko Ramm

24.03.2011

Segmentation of medical image data using ZIBAmira

Segmentation workshop, Berlin

15.06.2011

Fast simulation of digitally reconstructed radiographs

MXL project meeting, Bologna, Italy

28.09.2011

Robust and intuitive 3D meshing

MXL project meeting, Paris, France

Alexander Reinefeld

05.04.2011

Massively-parallel graph algorithms with MapReduce breadth-first and shortest path search

Cluster Day @ AEI, Potsdam

27.06.2011

Der HLRN-Verbund

ZEIK der Universität Potsdam

28.06.2011

Der HLRN-Verbund

BTU Cottbus

13.09.2011

Datenmanagement in der Cloud

Kickoff-Workshop des Exadata Demo-Cen-

ters im Zuse-Institut Berlin

Markus Reuther

14.05.2011

Vehicle Rotation Planning for Intercity Railways

8th International Conference on Integration

of AI and OR Techniques in Constraint

Programming (CPAIOR 2011), Railway

Workshop, Berlin

22.07.2011

Vehicle Rotation Planning for Intercity Railways

1st International Workshop on Highspeed

and Intercity Railways (IWHIR 2011), Hong-

Kong

08.09.2011

A Hypergraph Model for Railway Vehicle Rotation Planning

11th Workshop on Algorithmic Approaches

for Transportation Modelling, Optimization,

and Systems (ATMOS 2011), Saarbrücken

Susanna Röblitz

02.07.2011

Rare events in chemical reaction systems

European Congress of Mathematical and

Theoretical Biology (ECMTB), Krakow,

Polen

18.07.2011

Efficient solution of the chemical master equation

International Congress of Industrial and

Applied Mathematics (ICIAM), Vancouver,

Kanada

12.09.2011

Meshfree methods for the chemical master equation

Workshop on the Numerical Solution of

the chemical master Equation in Molecular

Biology (CME2011), Munich

Beate Rusch

11.05.2011

Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) im Überblick: Umfeld, Organisation und Dienste

„Der KOBV – der regionale Bibliotheksver-

bund für Berlin und Brandenburg“ Kollo-

quium für Fachbesucher aus Serbien

12.09.2011

Blick zurück nach vorne: Zehn Jahre Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

20.10.2011

Es bewegt sich was ... Die Gemeinsame**Normdatei**

Anwenderforum, Fachhochschule

Brandenburg

Guillaume Sagnol

19.05.2011

Optimization of Toll Enforcement on Highways: A game theoretic approach

COGA Seminar, TU Berlin

05.07.2011

Network-related problems in Optimal Experimental Design and Second Order Cone Programming

PROBASTAT 2011,

Slovenice, Slovakia

Carlos Saro

12.09.2011

20 Jahre digitale Dokumentation am DHM

Symposium „Vom Ordnen der Dinge“,

DHM, Berlin

18.10.2011

Vorstellung von GOS (gemeinsam mit Barbara Fichtl), Herbsttagung zur

Museumsdokumentation, ZIB, Berlin

Florian Schintke

02.–03.02.2011

Aspekte der Langzeitarchivierung

Mastering big data in science – großska-

liges Datenmanagement für die Wissen-

schaft, Steinbuch Centre for Computing

(SCC), KIT, Karlsruhe

14.04.2011

Replikation und Konsistenz in Cloud-Datei-systemen

Cloud-Computing-Tag im IKMZ der BTU

Cottbus

15.06.2011

Replikation und Konsistenz im Cloud-Datei-system XtreamFS

Seminar Cloud-Computing von

Prof. Andreas Reuter, Uni Heidelberg

15.12.2011

Scalaris

Vorlesung Transaktionale Systeme und

verteilte Datenbanksysteme von Prof.

Heinz Schweppe, FU Berlin (zusammen

mit Thorsten Schütt)

14.02.2012

Aspekte der Langzeitarchivierung,

Berlin-Brandenburgische Akademie

der Wissenschaften (gemeinsam mit

Alexander Reinefeld)

Thomas Schlechte

17.02.2011

Railway Track Allocation – Simulation and Optimization

4th International Seminar on Railway

Operations Modelling and Analysis

(ISROR), Rom, Italy

21.07.2011

Railway Track Allocation – Simulation, Aggregation, and Optimization

1st International Workshop on Highspeed

and Intercity Railways (IWHIR 2011),

Hong-Kong, VR China

02.09.2011

A CIP Approach for the Locomotive**Refueling Problem**

SOR 2011, Zurich, Switzerland

21.12.2011

Railway Track Allocation – Models and Algorithms

TU Berlin

Frank Schmitz

09.06.2011

Data Management in an HPCEnvironment

NEC User Group, 13th General Meeting,

Prague, June 6–9, 2011

Robert Schwarz

24.05.2011

Topology Planning of Gas Transportation Networks by Solving MINLPs

Workshop on Mathematical Optimization

for Energy Networks, CPAIOR 2011, Berlin

27.07.2011

Mathematical Optimization for Topology Planning in Gas Networks

Optimization 2011, Lissabon, Portugal

14.09.2011

Generating possible extensions to existing gas networks

IFIP 2011, Berlin

Thorsten Schütt

04.03.2011

Massively-parallel graph algorithms with MapReduce – breadth-first and shortest path search

Social Discovery in Large Scale Networks,

VZ, Berlin

15.12.2011

Scalaris

Vorlesung Transaktionale Systeme und

verteilte Datenbanksysteme von Prof.

Heinz Schweppe, FU Berlin (zusammen

mit Florian Schintke)

Jonas Schweiger

28.04.2011

Multistage Stochastic Programming in Strategic Telecommunication Network Planning

8th International Conference on Compu-

tational Management Science (CMS2011),

Neuchatel, Switzerland

28.05.2011

Sudoku vs. Graphenfärbung – Kombinatorische Optimierung am Frühstückstisch

Lange Nacht der Wissenschaften 2011, ZIB,

Berlin

17.09.2011

Multistage Stochastic Programming in Strategic Telecommunication Network PlanningORP³ – EURO conference for young OR

researchers, Cadiz, Spain

20.09.2011

Funknetzplanung mittels mehrstufiger stochastischer Optimierung

DMV Studierendenkonferenz, Köln

03.11.2011

Mathematical modeling of gas transmission networks

2nd Trondheim Gas Technology Conference, Trondheim, Norway

04.11.2011

Mathematical modeling of gas transmission networks

Research seminar, SINTEF, Trondheim, Norway

Jens Schwidder

12.09.2011

Mable+

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

Yuji Shinano

17.05.2011

Solving Hard MIP Instances using Massively Parallelized MIP Solvers

2011 SIAM Conference on Optimization, Darmstadt

22.06.2011

Ubiquity Generator framework

Optimization Group, Google, Paris, France

31.08.2011

Computational experiments with**Fiber SCIP – A Multithreaded MIP Solver**

OR 2011, Zurich, Switzerland

15.09.2011

Parallelizing MIP Solvers using the UG Framework

IBM Faculty Award, ZIB

13.11.2011

UG[SCIP]: Computational Experiments with a Parallel MIP Solver

INFORMS 2011, Charlotte, USA

18.11.2011

Parallelizing MIP Solvers using the UG Framework

Arizona State University, Arizona, USA

Daniel E. Steffy

11.02.2011

Advances in exact precision mathematical programming

Mathematics Seminar, Oakland University, Rochester, Michigan, USA

17.05.2011

Designing an efficient branch-and bound approach for exact mixedinteger programming

SIAM Conference on Optimization, Darmstadt

21.07.2011

An exact rational mixed-integer programming solver (Poster)

Mixed Integer Programming Workshop

2011, Waterloo, Canada

18.08.2011

Solving sparse linear systems of**equations over the rational numbers**

Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications

in Industry and Management, ZIB

07.10.2011

Exact solutions to mixed-integer linear programming problems

SIAM Conference on Applied Algebraic

Geometry, Raleigh, North Carolina, USA

10.10.2011

Advances in exact precision mathematical programming

Oberseminar Diskrete Optimierung, Research Institute for Discrete Mathematics, University of Bonn

13.11.2011

Improving the accuracy of optimization software

INFORMS Annual Meeting 2011, Charlotte,

North Carolina, USA

18.11.2011

Exact solutions to mixed-integer linear programming problems

Fields Institute Workshop on Hybrid Metho-

dologies for Symbolic-Numeric Computati-

on, Waterloo, Canada

Thomas Steinke

18.06.2011

Fun & Frustration: Experiences with Many-Core Accelerator Platforms

Accelerator SIG, HP-CAST Workshop,

Hamburg

Jan Stender

29.06.2011

Data Storage in Clouds

Contrail Summer School 2011, Hyeres,

France

Rüdiger Stephan

07.05.2011

Malen nach Zahlen

Ausstellungsbeitrag, Tag der Mathematik,

Beuth Hochschule für Technik Berlin

17.05.2011

Smaller Compact Formulation for**Lot-Sizing with Constant Batches**

SIAM Conference on Optimization,

Darmstadt

15.06.2011

Reducing the minimum T-cut problem**to polynomial size linear programming**

Cologne-Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization, Frascati,

Italien

20.–23.06.2011

Reducing the minimum T-cut problem**to polynomial size linear programming**

Posterpresentation, Mixed Integer Pro-

gramming Workshop, Waterloo, Kanada

31.08.2011

Solving Steel Mill Slab Problems with Branch and Price

OR 2011, Zürich, Schweiz

14.09.2011

Characterization of Facets of the Hop Constrained Chain Polytope via Dynamic ProgrammingORP³ EURO Conference for young OR

researchers, Cádiz, Spanien

Hinnerk Stüben

13.04.2011

Computer-Simulationen auf Hoch- und Höchstleistungsrechnern

ZEDAT, FU Berlin

20.05.2011

Wie schnell rechnet unser Computer? –**Rechenleistung im Anwendungsmix**

ZKI-Arbeitskreis Supercomputing,

DESY-Zeuthen

24.05.2011

Supercomputers at ZIB

CPAIOR 2011, ZIB

Elmar Swarat

16.02.2011

Aggregation Methods for Railway Networks

4th International Seminar on Railway

Operations, Modelling and Analysis –

RailRome2011, Rom, Italien

15.06.2011

Projekt IPKS – Automatisierte Dienstplanerstellung

Sitzung des Gesamtpersonalrates des Bundesamtes für Güterverkehr, Schwerin,

23.06.2011

An Integrated Vehicle Routing and Duty Roster Planning of Toll Control Inspectors

MAPSP 2011 – 10th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Schedu-

ling Problems, Nymburk (Neuenburg an

der Elbe), Tschechien

11.08.2011

Projekt Optimierung der Mautkontrolle, Präsentation der aktuellen Projektarbeit

Bundesamt für Güterverkehr, Köln

01.09.2011

An IP Approach for an Optimized Toll Enforcement

OR 2011 – International Conference on

Operations Research, Zürich, Schweiz

01.09.2011

Sascha Szott

04.03.2011

ALBERT – Mehrwerte durch vernetzte Recherche

Vernetzungstage 2011, Osnabrück

09.06.2011

ALBERT – eine Suchmaschine für Spezialbibliotheken

Late Breaker Vortrag auf dem

100. Bibliothekartag 2011, ZIB, Berlin

12.09.2011

Open Source Softwareentwicklung in der KOBV-Zentrale

9. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

09.11.2011

ALBERT Resource Discovery Solution – Vorstellung des neuen Hosting-Angebots

33. ASpB Tagung, Jülich

Doreen Thiede

05.05.2011

OPUS 4 – Was ist neu?

OPUS 4-Workshop, Berlin

06.06.2011

Organizing the Barcamp

Shifting Traditions – Librarians on the

Move, Berlin

08.06.2011

Operation gelungen, Patient... lebt!

Late Breaker Vortrag auf dem 100. Biblio-

thekartag 2011, Berlin

12.09.2011

Operation gelungen, Patient...?

9. KOBV-Forum, Berlin

04.10.2011

Hosting & DINI-Zertifizierung im KOBV

Open-Access-Tage 2011, Regensburg

08.11.2011

OPUS 4 – Hosting, Entwicklung und Zusammenarbeit (gemeinsam mit**Kristina Hanig, UB Würzburg)**

11. BVB Verbundkonferenz, München

Britta Weber

15.03.2011

Visual Data Analysis in Biology and Medicine

MIT Biophysics Seminar Series, MIT, Cambridge-MA, USA

17.03.2011

Fast Tracing of Microtubules in Electron Tomograms

Workshop on Visualizing Biological Data at VIZBI 2011, Broad Institute, Cambridge-

MA, USA

07.05.2011

Semi-automatic Segmentation of Microtubules in Electron Tomograms

Sixth International Congress on Electron

Tomography, EMBL, Heidelberg

Marcus Weber

16.06.2011

Rare Diseases: Non-Equilibrium Simulations for Drug Design

MyoGrad Summer School 2011, Berlin-Buch

13.07.2011

Compressed Sensing

FU Berlin, presentation for the habilitation,

Berlin

19.07.2011

New Mathematical Concepts for the Simulation of Molecular Binding Processes

ICIAM 2011, Thematic Minisymposium Talk,

Vancouver, Canada

05.09.2011

Computational Approximation of Transition Rates via an Infinitesimal Generator

Molecular Kinetics Workshop 2011, Invited

Talk, Berlin

09.09.2011

Mit Mathe heilen

9. Berliner MNU-Kongress

16.09.2011

Berufsmathematiker?

Gymnasium Martinum, Emsdetten

10.10.2011

Towards the Mathematics of Bivalent Binding Processes

Molecular Modelling Workshop 2011,

Heidelberg

08.11.2011

Neue mathematische Methoden für die Simulation von Bindungsprozessen

BioClub, FU Berlin

07.12.2011

No drugs! – Does Computational Drug Design fail?

IWR-Workshop, Heidelberg

Martin Weiser

28.04.2011

Numerical Electrocardiology – Challenges and Numerical Approaches

U Konstanz

10.11.2011

On goal-oriented error estimation for elliptic optimal control problems

5th GPCO, Kraków, Poland

28.11.2011

On goal-oriented error estimation for elliptic optimal control problems

Workshop on Optimal Control of Partial

Differential Equations, Chemnitz

Axel Werner

31.01.2011

FTTx-PLAN: Detailed FTTx planning with IP models

Workshop FTTx Networks, TU Wien,

Österreich

09.06.2011

Die Mathematik hinter FTTx-PLAN

BEL 2, Berlin

29.06.2011

Mathematische Modelle zur durchgängig energiesensiblen IKT

DESI Kickoff Meeting, T-Labs Berlin

18.08.2011

Planning optimized FTTx networks

Sino-German Workshop on Optimization,

Modeling, Methods and Applications

in Industry and Management, ZIB, Berlin

31.08.2011

Models for FTTx network planning

International Conference on Operations

Research (OR 2011), Universität Zürich,

Schweiz

Alexander Wiebel

06.04.2011

Glyphs for Non-Linear Vector Field Singularities

4th Workshop on Topology-Based Methods in Data Analysis and Visualization, ETH Zürich, Schweiz

23.10.2011

DCE-MRI-oriented Volume Rendering for Monitoring of Crohn's Disease

1st IEEE Symposium on Biological Data Visualization, Providence, RI, USA

16.12.2011

Recent Developments in Visualization of Diffusion Tensor Data

Dagstuhl Seminar 11501, Visualization and Processing of Tensors and Higher Order Descriptors for Multi-Valued Data, Schloss Dagstuhl

Kati Wolter

03.05.2011

Exact Integer Programming

Annual meeting DFG Priority Program „Algorithm Engineering“, FU Berlin

17.06.2011

An Exact Rational Mixed-Integer Programming Solver

15th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO XV), Armonk, USA

19.08.2011

An Exact Rational Mixed-Integer Programming Solver

Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, ZIB

Stefan Zachow

07.02.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

MXL Meetings

21.03.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

Peppermint Management GmbH

29.03.2011

Möglichkeiten der statistischen 3D Formanalyse

Vortrag am Universitätsklinikum Jena, HNO-Chirurgie

15.04.2011

Medical Image and Geometry Processing

Präsentation der Entwicklungsergebnisse des MXL Projektes im Rahmen der EU Begutachtung in Brüssel, Belgien

21.10.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

Frau Koch-Unterseher, Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung

09.12.2011

Präsentation im Studio da Vinci, ZIB

Mitglieder des Verbandes Berliner Kaufleute

Valentin Zobel

02.02.2011

Generalized Heat Kernel Signatures

19th International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision'2011 (WSCG), Pilsen, Tschechische Republik

VORLESUNGEN UND SEMINARE**Wolfgang Baumann: Jacobs University Bremen**

WS 2011/12 Parallel programming with MPI and OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs mit Hinnerk Stüben)

Wolfgang Baumann: TU Berlin

WS 2011/12 Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs mit Hinnerk Stüben)

Ralf Borndörfer: TU Berlin

WS 2011/12 Computational Integer Programming (VL 4 SWS, mit T. Koch)

Ralf Borndörfer: TU Darmstadt

WS 2010/11 Einführung in die Optimierung (VL 4 SWS)

WS 2010/11 Proseminar über Algorithmische Diskrete Mathematik (SE 2 SWS)

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 2011 Ausgewählte Kapitel der Funktionentheorie (VL 2 SWS)

Sven Burger: TU Berlin

WS 2010/11 Computational Nanooptics (Vorlesung)

WS 2011/12 Computational Nanooptics (Vorlesung)

Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 2010/11, SS 2011 Oberseminar Scientific Computing (Mitveranstalter: C. Carstensen, H. Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB), Ralf Kornhuber (FUB), V. Mehrmann (TUB), S. Reich (U Potsdam), K. Polthier (FUB), C. Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB), H. Yserentant (TUB))

Konstantin Fackeldey: FU-Berlin

SS 2011 Projektseminar: Mathematical Drug Design (Analysis I)
WS 2011/12 Seminar: Polyedrische Geometrie – Finite Elemente (Simulation von Biomolekülen)

Armin Fügenschuh: TU Berlin

WS 2011/11 Lineare Algebra für Ingenieure, TU-Berlin, Fachbereich Mathematik, 2 SWS Vorlesung

Ulrike Golas: TU Berlin

WS 2010/11 Graph- und Modelltransformation (Vorlesung und Übung)
WS 2011/12 Anwendung von Graphtransformation in verteilten Systemen (Vorlesung und Übungen, zusammen mit Alexander Reinefeld)

Martin Grötschel: TU Berlin

SS 2011 Geometry of Cuts and Metrics (ADM III) (Vorlesung)
WS 2011/12 Seminar: Proof Techniques in Polyhedral Combinatorics (Blockseminar, zusammen mit Annie Raymond (Berlin Mathematical School))

Hans-Christian Hege: Mediadesign Hochschule für Design und Informatik

WS 2011/12 3D Simulation/Echtzeit-visualisierung (Vorlesung/Blockkurs)

Ingrid Hotz: FU Berlin

SS 2011 Introduction to Scientific Visualization (Vorlesung)
WS 2010/11 Computational Geometry (Proseminar)
WS 2010/11 Visualization Topics (Seminar)

Corinna Klapproth: FU Berlin

WS 2011/12 Numerische lineare Algebra (Seminar mit Ralf Kornhuber, FU Berlin)

Matthias Läuter: Universität Potsdam

SS 2011 Physik der Atmosphäre (zusammen mit Klaus Dethloff)

Olaf Paetsch:

09.–10.08.2011 Einführung in die digitale Bildverarbeitung (FU-Sommeruni)
11.–12.08.2011 Einführung in die Computergrafik (FU-Sommeruni)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

WS 2011/12 Methoden der parallelen Programmierung (Seminar, zusammen mit Thorsten Schütt)
WS 2010/11 Architektur paralleler und verteilter Systeme (Vorlesung und Übungen, zusammen mit Florian Schintke)
SS 2011 Architektur und Programmierung von heterogenen Manycore-Systemen (Vorlesung und Praktikum, zusammen mit Thomas Steinke)
WS 2011/12 Anwendung von Graphtransformation in verteilten Systemen (Vorlesung und Übungen, zusammen mit Ulrike Golas)

Susanna Röblitz:

SS 2011 Projektseminar „Mathematical Drug Design“
SS 2011 Vorlesung „Höhere Analysis“
WS 2011/12 Vorlesung „Numerical Methods for Systems Biology“

Florian Schintke: HU Berlin

WS 2010/11 Architektur paralleler und verteilter Systeme (Vorlesung und Übungen, zusammen mit Alexander Reinefeld)

Thorsten Schütt: HU Berlin

WS 2011/12 Methoden der parallelen Programmierung (Seminar, zusammen mit Alexander Reinefeld)

Thomas Steinke: HU Berlin

SS 2011 Architektur und Programmierung von heterogenen Manycore-Systemen (Vorlesung und Praktikum, zusammen mit Alexander Reinefeld)
WS 2009/10 Programmierung von Hardwarebeschleunigern (Vorlesung und Projekt, zusammen mit Alexander Reinefeld)

Rüdiger Stephan: TU Berlin

WS 2010/11 Computerorientierte Mathematik I (Übung)
WS 2010/11 Mathematics for Engineering II (Vorlesung)
SS 2011 Analysis II für Ingenieure (Übung)

Hinnerk Stüben: HU Berlin

WS 2010/11 Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler (Vorlesung mit Übungen)

Hinnerk Stüben: Jacobs Universität Bremen

WS 2010/11 Parallel programming with MPI and OpenMP (and OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs mit Wolfgang Baumann))
28.–30.03.2011 Single-processor optimization (Kurs)

Hinnerk Stüben: TU Berlin

WS 2010/11 Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs)

Marcus Weber: FU Berlin

SS 2011 Projektseminar: Mathematical Drug Design (Elementargeometrie)
WS 2011/12 Simulation von Biomolekülen

Martin Weiser: FU Berlin

WS 2011/12 Analysis I (lehramtsbezogen) (Vorlesung)

Martin Weiser: TU Berlin

WS 2010/11 Analysis II für Ingenieure (Vorlesung mit M. von Renesse und W. Böse)
WS 2010/11 Numerik I (Zentralübung)
SS 2011 Lineare Algebra I für Ingenieure (Vorlesung mit C. Schröder und R. Seiler)
SS 2011 Inside Finite Elements (Vorlesung und Übung)

Axel Werner: TU Berlin

WS 2010/11 GPE course: Mathematical Tools for Engineering and Management (VL 2 SWS)

Alexander Wiebel:

WS 2011/12 Visualisierung (Seminar)

MITVERANSTALTER AUSWÄRTIGER TAGUNGEN**Ralf Borndörfer**

16.–17.02.2011 Sitzung der GOR AG Verkehr und Logistik Berliner Verkehrsbetriebe (BVG), Berlin

Wolfgang Dalitz

08.–12.03.2011 Minisymposium „Information und Kommunikation in der Mathematik“ im Rahmen der DMV/GDM Tagung in München

Peter Deuffhard

04.–06.09.2011

2nd Workshop on Molecular Kinetics Mitveranstalter: F. Noé (FUB), B. Keller (FUB), J.-H. Prinz (FUB), Ch. Schütte (FUB), V. Pande (Stanford U), J. Chodera (UC Berkeley)

Konstantin Fackeldey, Susanna Röblitz und Marcus Weber

02.07.2011

Minisymposium „Bridging Time Scales in Biological Sciences“ European Conference of Mathematics and Theoretical Biology, Krakow, Polen

Konstantin Fackeldey

20.07.2011

Minisymposium „Coupling Atomistic and Continuum Simulations: Coping with Length and Time Scales“ International Council for Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2011), Vancouver, Canada

Ulrike Golas

27.03.2011

6th ACCAT workshop (ACCAT'11) on applied and computational category theory im Rahmen der ETAPS, Saarbrücken

Martin Grötschel

27.–28.02.2011

IMU EC Meeting Perth, Australien

01.–02.03.2010

Mathematics Workshop Perth, Australien

12.–15.10.2011

Workshop on Applications in Transport, Logistics and Networks Perth, Australia

Hans-Christian Hege

26.–28.09.2011

4th Workshop on Topology-Based Methods in Data Analysis and Visualization (Member of Program Committee) ETH Zürich, Schweiz

26.–28.09.2011

8th International Symposium on Visual Computing 2011 (Member of Program Committee) Las Vegas, NV, USA

04.–06.10.2011

Vision, Modeling, and Visualization – VMV11

(Member of Program Committee)
Berlin

23.–24.10.2011

IEEE Symposium on Biological Data Visualization – BioVis 2011

(Member of Program Committee)
Providence, RI, USA

23.–24.10.2011

IEEE Symposium on Large Data Visualization – LDAV 2011

(Member of Program Committee)
Providence, RI, USA

24.10.2011

Working with Uncertainty Workshop
(Member of Program Committee)

Providence, RI, USA

25.–28.10.2011

IEEE Visualization Conference – Vis 2011

(Member of Program Committee)
Providence, RI, USA**KOBV/FAK-Geschäftsstelle**

20.06.2011

Präsentation Web of Knowledge
(Thomson Reuters) Staatsbibliothek
zu Berlin

21.06.2011

Präsentation Web of Knowledge
(Thomson Reuters) Humboldt-Universität
Berlin, Erwin-Schrödinger-Zentrum

23.06.2011

Präsentation Scopus (Elsevier)
Humboldt-Universität Berlin,
Erwin-Schrödinger-Zentrum**Hans Lamecker**

18.09.2011

Workshop on Computational and
Clinical Applications in Abdominal
Imaging at MICCAI
(Member of Program Committee)
Toronto, Canada**Amir Niknedjad**

01.08.–04.09.2011

(College of Mount Saint Vincent, New York,
USA)**Steffen Prohaska**

31.06.–03.07.2011

EuroVis 2011 Eurographics/IEEE

Symposium on Visualization
(Member of Program Committee)

Bergen, Norway

Susanna Röblitz

06.–08.05.2011

MATHEON/BMS Young Researchers Week-
end in Blossin**Alexander Wiebel**

04.–06.04.2011

TopoInVis 2011, Fourth Workshop on
Topology-Based Methods in Data Analysis
and Visualization

(Member of Program Committee)

Zurich, Switzerland

24.–26.07.2011

Computer Graphics, Visualization,
Computer Vision and Image Processing
(Member of Program Committee)
Rome, Italy**Stefan Zachow**

14.–16.09.2011

Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft
für Computer- und Roboterassistierte
Chirurgie (CURAC)
Magdeburg

TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

GASTVORTRÄGE

18.01.2011

Stefan Brück

(Qualcomm, Nürnberg)

**A short tutorial on Cooperative Multipoint
Transmission (CoMP)**

14.02.2011

Peter Eisert(Heinrich-Hertz-Institut and Humboldt-
Universität Berlin)**3D Video Analysis by Image Warping**

16.02.2011

Seif Haridi

(Swedish Institute of Computer Science)

18.02.2011

B. M. A. Rahman

(City University London)

**Rigorous characterization of nanophotonic
devices by using the finite element method**

18.02.2011

Kersten Schmidt

(TU Berlin)

**Modelling of TE and TM modes in Photonic
Crystal Wave-guides**

18.02.2011

Christian Engström

(ETHZ)

Material models and resonances in optics

18.02.2011

Kurt Busch

(Uni Karlsruhe)

**Discontinuous Galerkin Methods in
Nano-Photonics**

17.03.2011

Martina Schmid

(Helmholtz-Zentrum Berlin)

Plasmonische Effekte in Solarzellen

06.04.2011

Markus Leitner

(Technische Universität Wien)

**Stabilized Branch-and-Price for Topological
Network Design Problems**

11.04.2011

Sara Mattia

(Technische Universität Dortmund)

**Separating tightmetric inequalities by
bilevel programming**

11.04.2011

Thomas Peters

(University of Connecticut, Storrs, CT, USA)

**Applying Knot Theory to Animation
and Visualization**

10.05.2011

Seif Haridi

(Swedish Institute of Computer Science)

20.06.2011

Larry L. Schumaker

(Vanderbilt University, Nashville, TN, USA)

Splines on Meshes with Hanging Vertices

28.06.2011

Veronika Zimmer

(Universität Lübeck)

Lie-Gruppen/Dämonen-Registrierung

05.07.2011

Frank Müller(North Carolina State University, Raleigh,
NC, USA)**On Determining a Viable Path to Resilience
at Exascale**

18.07.2011

Raghu Machiraju(The Ohio State University, Columbus, OH,
USA)**Quantitative Cellular Phenotyping in
Tissue Microenvironments**

28.10.2011

Christiane Becker

(Helmholtz-Zentrum Berlin)

Silizium-Nanostrukturen in der Photovoltaik

02.11.2011

Thomas Müller-Reichert(Experimentelles Zentrum im Medizinisch-
Theoretischen Zentrum, TU Dresden)**Three-dimensional reconstruction of
spindle assembly in C. elegans**

07.11.2011

Eugene Zhang(Oregon State University, Corvallis, OR,
USA)**Topological Analysis and Visualization of
2D Asymmetric Tensor Fields**

22.–29.11.2011

Gary Froyland(University of New South Wales, Sydney,
Australien)**The recoverable robust tail assignment
problem**

05.12.2011

Stephan Held

(Universität Bonn)

Combinatorial Optimization in Chip Design

GASTAUFENTHALTE

**Fabio D'Andreagiovanni: RTWH Aachen,
Aachen (Germany)**29.07.2011 New Pure 0–1 Programming
approaches to wireless network design
(Lehrstuhl II für Mathematik)**Meng Xu**

(Beijing Jiatong University, Beijing, China)

01.01.–28.02.2011

J. Christopher Beck(Department of Mechanical & Industrial
Engineering University of Toronto, Toronto,
Ontario M5S 3G8, Canada)

01.01.–31.06.2011

Yuji Shinano(Tokyo University of Agriculture and
Technology, Tokyo, Japan)

01.01.2011–31.12.2011

Stefan Brück

(Qualcomm, Nürnberg)

18.01.2011

Thomas Liebling(École Polytechnique Fédérale de Lausanne,
Lausanne, Schweiz)

17.–19.02.2011

Dominik Flöß (KIT Karlsruhe) 01.03.–11.04.2011	Nathan Sturtevant (University of Denver, Denver, Colorado, USA) 22.–26.05.2011
Bertrand Omont (L'École Centrale Paris) 01.03.–31.12.2011	Andrea Lodi (Università di Bologna, Bologna, Italien) 22.–28.05.2011
Konstanty Junosza-Szaniawski (TU Warschau, Polen) 14.–27.03.2011 und 30.06.–07.07.2011	Pietro Belotti (Clemson University, Clemson, South Carolina, USA) 23.05.–19.06.2011
Sławomir Kwasiborski (TU Warschau, Polen) 17.–23.03.2011	Craig Boutilier (University of Toronto, Toronto, Kanada) 24.–29.05.2011
Paweł Rzążewski (TU Warschau, Polen) 17.–23.03.2011	Hans Mittelmann (Arizona State University, Tempe, Arizona, USA) 27.05.–07.06.2011
Markus Leitner (Technische Universität Wien) 04.–07.04.2011	Holger Sebert (Ruhr-Universität Bochum) 10.06.2011
Sara Mattia (Technische Universität Dortmund) 10.–15.04.2011	Thomas Wolf (Brock University, St. Catherines, Ontario, Kanada) 14.–21.06.2011
Thomas Peters (University of Connecticut, Storrs, CT, USA) 11.04.2011	Larry L. Schumaker (Vanderbilt University, Nashville, TN, USA) 20.06.2011
Xin Liu (Chinese Academy of Sciences, Beijing, China) 19.–28.05.2011	Raghu Machiraju (The Ohio State University, Columbus, OH, USA) 18.–22.07.2011
Marijn Heule (TU Delft, Niederlande) 22.–27.05.2011	Amir Niknedjad (College of Mount Saint Vincent, New York, USA) 01.08.–04.09.2011
Ian Gent (University of St. Andrews, Scotland, UK) 22.–28.05.2011	Nam Dũng Hóang (Hanoi University of Science and Technology) 11.08.–11.09.2011
Gilles Pesant (Écoles Polytechnique de Montréal, Montréal, Québec, Kanada) 22.–27.05.2011	Hóang Xúan Phú (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam) 14.–27.08.2011
John Chinneck (Carlton University, Ottawa, Ontario, Kanada) 22.–24.05.2011	

Julián Lamas-Rodríguez (Universidade Santiago de Compostella, Spanien) September–Dezember 2011	Stefan Weltge (Universität Magdeburg) 01.10.–31.12.2011
Thomas Müller-Reichert (Experimentelles Zentrum im Medizinisch-Theoretischen Zentrum, TU Dresden) 02.11.2011	Eugene Zhang (Oregon State University, Corvallis, OR, USA) 07.11.2011
Sanjeeb Dash (IBM Watson Research, New York, USA) 01.–02.12.2011	Stephan Held (Universität Bonn) 03.–06.12.2011
Dieter Weninger (Lehrstuhl für Wirtschaftsmathematik, Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen) 06.–09.12.2011	Stephan Sorgatz (Universität Magdeburg) 12.12.2011

TAGUNGEN UND VERANSTALTUNGEN	06.–08.05.2011 MATHEON/BMS Young Researchers' Weekend, Blossin Veranstalter: Susanna Röblitz, Timo Berthold
18.02.2011 4th Annual Meeting Photonic Devices MATHEON Workshop Veranstalter: Benjamin Kettner, Frank Schmidt	11.05.2011 Der KOBV – der regionale Bibliotheksverband für Berlin und Brandenburg – Kolloquium für Fachbesucher aus Serbien Veranstalter: KOBV-Zentrale
21.02.2011 Präsentation Summon (Serials Solutions) Veranstalter: KOBV-Zentrale	12.05.2011 Besuch einer Schülergruppe des Oberstufenzentrums für Industrie und Datenverarbeitung, ZIB Veranstalter: Hans-Hermann Frese, The Anh Pham, Cornelia Auer, Kai Pöthkow
08.03.2011 Fachkolloquium Leistungsmessung Veranstalter: KOBV-Zentrale	23.05.2011 BMBF-KOsMoS Verbundworkshop Veranstalter: Torsten Klug, Thomas Schlechte
18.03.2011 Besuch einer Schülergruppe des Heinrich-Hertz-Gymnasiums, ZIB Veranstalter: Peter Deuffhard, Martin Weiser, Frank Schmidt, Hans-Hermann Frese, Johanna Ridder, Christoph Petz, Ulrike Homberg, Alexander Wiebel	23.–27.05.2011 8th International Conference on Integration of Artificial Intelligence and Operations Research Techniques in Constraint Programming for Combinatorial Optimization Problems (CPAIOR 2011) Veranstalter: Timo Berthold, Ambros M. Gleixner, Stefan Heinz, Thorsten Koch
18.03.2011 Schülerbesuch des Freiherr-vom-Stein-Gymnasiums, ZIB Veranstalter: Peter Deuffhard, Martin Weiser, Frank Schmidt, Hans-Hermann Frese, Johanna Ridder, Christoph Petz, Ulrike Homberg, Alexander Wiebel	06.06.2011 Berlin-Seminar: Shifting Tradition – Librarians on the move (im Rahmen von „Cycling for Libraries“) Veranstalter: KOBV-Zentrale
18.03.2011 Die Geometrie des Telefonierens – Telekommunikation und Mathematik, Tag der Naturwissenschaften, Carl Bechstein Gymnasium Erkner Veranstalter: Axel Werner	14.–19.08.2011 Sino-German Workshop on Optimization, Modelling, Methods, and Applications in Industry and Management Veranstalter: Thorsten Koch, Xiaoling Sun (Fudan University)
04.04.2011 Automatische Texterschließung mit Tools der Averbis GmbH Veranstalter: KOBV-Zentrale	24.08.2011 Präsentation IEEE Computer Society Digital Library Veranstalter: KOBV-Zentrale, FAK-Geschäftsstelle
08.04.2011 ERM – die Eierlegende Wollmilchsau? 5. FAK Konsortialtag Veranstalter: KOBV-Zentrale, FAK-Geschäftsstelle	09.11.2011 Schülerbesuch der Max-Eyth-Fachoberschule aus Kassel Veranstalter: Ralf Borndörfer, Frank Schmidt, Hans-Hermann Frese, Ursula Droebes, Heiko Ramm, Carl Martin Grewe
05.05.2011 OPUS 4 Workshop Veranstalter: KOBV-Zentrale	09.12.2011 Primo-Workshop (ExLibris) Veranstalter: KOBV-Zentrale

12.09.2011 9. KOBV-Forum – Wir feiern Geburtstag Veranstalter: KOBV-Zentrale
13.09.2011 Schnelle Algorithmen und schnelle Rechner für Exascale Computing – Kickoff des Exascale DemoCenters Veranstalter: Wolfgang Pyszkalski und Alexander Reinefeld
16.09.2011 Schülerbesuch des Ev. Gynmasiums Hermannswerder bei Potsdam, ZIB Veranstalter: Hans-Hermann Frese, Nico Kruber, Christoph Petz, Ulrike Homberg
28.09.2011 Workshop zur Einführung in die Gemeinsame Normdatei GND Veranstalter: KOBV-Zentrale
17.–19.10.2011 Herbsttagung zur Museumsdokumentation, ZIB, Berlin Veranstalter: Barbara Fichtl, Carlos Saro in Zusammenarbeit mit dem Institut für Museumsforschung und dem Deutschen Museumsbund
20.10.2011 Besuch einer Studentengruppe der Universität Jyväskylä, ZIB Veranstalter: Peter Deuffhard, Florian Schintke, Nico Kruber, Hans-Hermann Frese, Kai Pöthkow, Olaf Paetsch
09.11.2011 Schülerbesuch der Max-Eyth-Fachoberschule aus Kassel Veranstalter: Ralf Borndörfer, Frank Schmidt, Hans-Hermann Frese, Ursula Droebes, Heiko Ramm, Carl Martin Grewe
09.12.2011 Primo-Workshop (ExLibris) Veranstalter: KOBV-Zentrale

SOFTWARE UND SERVICE

FOLGENDE SOFTWARE WURDE IM ZIB ENTWICKELT UND WIRD LIZENSIERT:

NUMERISCHE ALGORITHMEN

BioPARKIN

BioPARKIN kombiniert eine grafische Benutzeroberfläche für die Modellierung systembiologischer Netzwerke mit einer flexiblen **C++**-Bibliothek zur Simulation und Parameteridentifizierung
Ansprechpartner: M. Wade, T. Dierkes (dierkes@zib.de)

CodeLib

CodeLib umfasst Newton, Gauss- und IVP-Codes.
Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

JCMsuite

JCMsuite ist ein kommerziell vertriebenes Softwarepaket zur rigorosen Lösung der Maxwell'schen Gleichungen für optische Anwendungen.
Ansprechpartner: Frank Schmidt (frank.schmidt@zib.de)

Kardos

Kardos ist ein FE-Paket zur Lösung parabolischer Differentialgleichungssysteme.
Ansprechpartner: Bodo Erdmann (erdmann@zib.de)

KASKADE 7

KASKADE 7 ist eine flexible **C++**-Bibliothek zur FE-Lösung partieller Differentialgleichungssysteme.
Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

NewtonLib

NewtonLib beinhaltet Software zu Peter Deuffhard „Newton Methods for Nonlinear Problems-Affine Invariance and Adaptive Algorithms“.
Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

ZIBgridfree

ZIBgridfree ist eine Software zur thermodynamischen Simulation von Wirkstoffmolekülen und Wirkstoff-Target Komplexen.
Ansprechpartner: Marcus Weber (weber@zib.de)

VISUALISIERUNG

ZIBAmira

ZIBAmira ist einmodulares Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Bildanalyse, Geometrie-Rekonstruktion und Datenvisualisierung. Es bietet eine Reihe von zusätzlichen Möglichkeiten gegenüber dem ursprünglich auch am ZIB entwickelten Amira (www.amira.com).
Ansprechpartner: Steffen Prohaska (prohaska@zib.de), Daniel Baum (baum@zib.de)

Lenné3D-Player

Lenné3D bezeichnet die am ZIB entwickelten Landschaftsvisualisierungssysteme. Der Lenné3D-Player stellt Szenen realistisch, skizzenhaft oder gemischt dar, bietet Kamerapfade und Videoexport für Offline-Darstellungen.
Ansprechpartner: Steffen Prohaska (prohaska@zib.de)

Biosphere3D

Biosphere3D dient zur Landschaftsvisualisierung. Es ermöglicht Vegetationsdarstellung auch in größeren Szenarien.
Webseite: www.biosphere3d.org
Ansprechpartner: Marco Klindt (klindt@zib.de), Steffen Prohaska (prohaska@zib.de)

OPTIMIERUNG

ZIB Optimization Suite

Die ZIB Optimization Suite umfasst die Teilprodukte **SCIP**, **Soplex** und **Zimpl**. Die drei Produkte sind in einem Paket zu erhalten unter <http://zibopt.zib.de>, aber auch einzeln erhältlich.

SCIP (Mixed Integer Program Solver)
SoPlex (Implementierung des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von linearen Programmen)
Zimpl (Programmiersprache, um das math. Modell eines Problems in ein lineares oder gemischt-ganzzahliges Programm zu übersetzen)
Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

MIPLIB 2003, MIPLIB 2010

Hierbei handelt es sich um ein Standard-Test-Set für den Vergleich von MIP-Lösern.
Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

SteinLib Testdata Library

Es handelt sich um eine Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen, die beständig aktualisiert und erweitert wird.
Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

Sndlib – Survivable Network Design Library

Sndlib ist eine Bibliothek von standardisierten Testdatensätzen für die Festnetzplanung.
Ansprechpartner: Christian Raack (raack@zib.de)

ttplib – Library for Train Timetabling Problems

Die Zielsetzung von **ttplib** ist es, mathematische Modelle und Algorithmen für das Fahrplanungssystem im Bahnverkehr evaluieren zu können.
Ansprechpartner: Thomas Schlechte (schlechte@zib.de)

MCF – Netzwerksimplexalgorithmus

MCF ist eine der schnellsten Implementierungen des Netzwerksimplexalgorithmus, sie ist eines der Standardprogramme zum Testen neuer Mikroprozessoren.
Ansprechpartner: Andreas Löbel (loebel@zib.de)

ZIB Traffic Optimization Suite

Die ZIB Traffic Optimization Suite ist eine Sammlung von mathematischen Optimierungstools zur Lösung von Planungsproblemen im Nah-, Bahn, und Luftverkehr.
Sie umfasst folgende Tools:

- VS-OPT (Optimierungstool zur Fahrzeugumlaufplanung)
- DS-OPT (Optimierungstool zur Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr)
- IS-OPT (Optimierungstool zur gleichzeitigen Planung von Fahrzeugumläufen und Fahrdiensten im ÖPNV)
- CS-OPT (Planung des Einsatzes von Flugzeugbesatzungen)
- TS-OPT (Optimierungstool zur Allokation von Eisenbahnfahrtrassen)
- Veranstaltungsplaner für die „Lange Nacht der Wissenschaften“

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer (borndoerfer@zib.de)

WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

REDUCE

Es handelt sich um ein Programmsystem für symbolische Mathematik.
Ansprechpartner: Winfried Neun (neun@zib.de)

INFORMATIK

XtreemFS

XtreemFS ist ein verteiltes POSIX-kompatibles Dateisystem für Grid- und Cloud-Computing. Es bietet Methoden für einen hohen Datendurchsatz sowie verbesserte Datenverfügbarkeit durch Replikation.
Ansprechpartner: Michael Berlin (berlin@zib.de)

BabuDB

BabuDB ist eine Datenbank zur Speicherung von Schlüssel-Wertepaaren. Es nutzt das Konzept der Log-Structured Merge-Trees und wird zur persistenten Speicherung von Metadaten (z. B. in verteilten Dateisystemen) eingesetzt.
Ansprechpartner: Michael Berlin (berlin@zib.de)

Scalaris

Scalaris ist ein zuverlässiger, skalierbarer verteilter Key/Value-Store auf Basis von Peer-to-Peer-Protokollen. **Scalaris** bietet atomare Operationen und Transaktionen auf replizierten Daten.
Ansprechpartner: Florian Schintke (schintke@zib.de), Thorsten Schütt (schuett@zib.de)

GNOMS

GNOMS ist ein flexibles Datenmanagementsystem für den Einsatz im Grid-Computing. Neben einem Workspace-Konzept bietet es einen erweiterbaren Task-basierten Mechanismus zum Bereitstellen und Verteilen von Daten.
Ansprechpartner: Maik Jorra (jorra@zib.de)

Theseus

Theseus ist ein Framework zur Erkennung des Faltungstyps von Proteinen.
Ansprechpartner: Thomas Steinke (steinke@zib.de)

INFORMATIONSDIENSTE

Math-Net-Informationsserver

Unter der Adresse www.math-net.org befindet sich das Portal des Math-Net. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software angeboten.
Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

Informationsdienste des eLib-Servers

Auf dem eLib-Server werden verschiedene Informationsdienste angeboten:

www.math-net.de/links (Math-Net-Links)
http://elib.zib.de/ICM98 (International Congress of Mathematics)
http://webdoc.gwdg.de/ICM98
Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

Server der International Mathematics Union (IMU)

Das ZIB betreut technisch und inhaltlich den Web-Server der IMU. Neben allgemeinen Informationen beinhaltet der Server auch die neusten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU sowie den elektronischen Rundbrief.
Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

KOBV-DIENSTE

Der KOBV betreibt Informationsdienste für bibliothekarische Angebote im Internet mit Schwerpunkt auf Berlin und Brandenburg. Darüber hinaus ist der KOBV regionaler Dienstleister für die Bibliotheken.

www.kobv.de
 (KOBV-Informationsserver)

http://digibib.kobv.de
 (KOBV-Portal Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg)

http://digibib.kobv.de/vkfilm
 (Verbundkatalog Film, Literatur, DVD, Videos)

http://digibib.kobv.de/vkfilm-filme
 (Verbundkatalog DVDs und Videos)

http://digibib.kobv.de/judaica
 (Verbundkatalog Judaica)

http://digibib.kobv.de/vknoten
 (Verbundkatalog Noten)

http://volltexte.kobv.de
 (KOBV-Volltextserver)

http://bibliotheken.kobv.de
 (Bibliothekenführer)

http://opus4.kobv.de
 (OPUS-Server)

