

ZIB

**KONRAD-ZUSE-ZENTRUM
FÜR INFORMATIONSTECHNIK BERLIN**
JAHRESBERICHT 2012

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

ISSN: 0934-5892

© 2013 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



VORWORT

Am 1. Oktober 2012 hat Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard, der über 25 Jahre Präsident des Konrad-Zuse-Zentrums war, den Staffelstab an mich weitergegeben. Eine passendere Stelle als das Vorwort zum Jahresbericht 2012 gibt es nicht, um Dank zu sagen. Das möchte ich hier ganz persönlich und auch im Namen aller Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ZIB tun. Peter Deuffhard hat das ZIB mit ganzem Herzen, großem intellektuellem und hohem persönlichem Einsatz zu einem exzellenten wissenschaftlichen Institut entwickelt. Ich danke für sein Engagement, die gute kollegiale Zusammenarbeit und seinen festen Stand „auf der Brücke“ – insbesondere bei hohem Wellengang.

Im vergangenen Jahr gab es für das ZIB eine zweite wichtige personelle Veränderung. Wir konnten Prof. Dr. Christof Schütte, unseren Wunschkandidaten, als neuen Vizepräsidenten gewinnen. Er ist Hochschullehrer im Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin und dem ZIB seit vielen Jahren verbunden.

Wie in den Jahren zuvor stellen wir in diesem Jahresbericht unseren interessierten Freunden, Kooperationspartnern und aufmerksamen Beobachtern nur einige wenige ausgewählte Leuchtturmprojekte im Detail vor. Die Gesamtheit der Projekte, die Publikationen und wissenschaftlichen Aktivitäten finden sich auf unseren Webseiten (www.zib.de).

Das ZIB war wie bisher in einer Fülle von Projekten aus seinen Anwendungsschwerpunkten in der Mathematik und Informatik aktiv. In der Abteilung „Numerische Analysis und Modellierung“ lag der Focus z. B. auf dem mathematischen Entwurf von Implantaten, der Spurensuche im Trinkwasser, optischen Resonanzen in Nanostrukturen und auf der modellgestützten Medikation in der Reproduktionsmedizin.

In der „Visualisierung und Datenanalyse“ haben wir u.a. folgende Projekte bearbeitet: die realistische 3D-Modellierung von neuronalen Netzwerken auf Basis von Mikroskopiebildern sowie die 3D-Rekonstruktion von anatomischen Strukturen aus 2D-Röntgenbildern für die individualisierte Therapieplanung. Weiterhin haben wir eine Software für iPads entwickelt, die es Museen ermöglicht, Kontexte zu Exponaten begreifbar zu machen; sie wurde erfolgreich im Pergamonmuseum eingesetzt.

In der „Optimierung“ haben wir uns im Jahr 2012 neben vielem anderem mit robusten Kommunikationsnetzen und mit der Optimierung des Mautkontrollsystems auf deutschen Autobahnen beschäftigt; wir haben die Organisation des ISMP 2012 (mit über 1.700 Vorträgen) durch mathematische Optimierung unterstützt und verbesserte Methoden der ganzzahligen Programmierung für das „Supply Chain Management“ entwickelt.

Im der Abteilung „Wissenschaftliche Information“ standen die Dokumentenklassifikation sowie verschiedene Hosting-Projekte für Bibliotheksanwendungen im Vordergrund. Seit Oktober 2012 ist die neue Servicestelle Digitalisierung des Landes Berlin „digiS“ am ZIB beheimatet. Das Projekt „EWIG“ beschäftigte sich mit Workflowkomponenten für die Langzeitarchivierung von Forschungsdaten in den Geowissenschaften.

Zentrale Themen im Bereich „Informatik“ waren das verteilte Datenmanagement sowie die Bearbeitung skalierbarer und hardwarenaher Algorithmen. Der neue Supercomputer HLRN-III wurde mit einem Investitionsvolumen von 30 Mio. € ausgeschrieben, im Dezember 2012 ging der Bauauftrag an die Firma Cray. Der neue Großrechner wird den HLRN-II im September 2013 ablösen.

Die Summe aller Projekte führte zu einer Einwerbung von Drittmitteln in Höhe von fast 5 Mio. €. Wie in den Vorjahren war das ZIB in zahlreichen Kooperationen mit FU, HU, TU und Charité sowie mit vielen außeruniversitären Forschungseinrichtungen aktiv. Das von TU, FU, HU, WIAS und ZIB gemeinsam getragene DFG-Forschungszentrum MATHEON ist bis Mitte 2014 durch die DFG-Förderung gesichert. Im Mai 2012 bewilligte die Einstein Stiftung das Einsteinzentrum ECMath. Es soll nach Ablauf der MATHEON-Förderung seine Arbeit aufnehmen. In einer Start-up-Phase werden derzeit die institutionellen Strukturen für eine enge Kooperation zwischen dem MATHEON, der Berlin Mathematical School (BMS) und dem Deutschen Zentrum für Lehrerbildung in der Mathematik (DZLM) geschaffen.

Erfolgreiche Verbundprojekte im Bereich „Service“ des ZIB sind weiterhin der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV), das landeseigene Wissenschaftsnetz BRAIN und unsere langfristige Datenarchivierung sowie die bereits erwähnte neue Servicestelle Digitalisierung digiS.

Der Wissenschaftliche Beirat des ZIB tagte am 24. und 25. September 2012. Wir sind erschüttert darüber, dass uns Prof. Dr. Michael Hofmeister hierbei letztmalig mit seinem Rat und seiner Expertise zur Seite stand. Im Februar 2013 vernahmen wir die traurige Nachricht von seinem Tod. Er war dem ZIB über viele Jahre verbunden. Wir werden ihn als kompetenten und freundlichen Kollegen in Erinnerung behalten.

Der Wissenschaftliche Beirat würdigte in seiner Sitzung die Arbeit des langjährigen Präsidenten Prof. Deuffhard und den gleichbleibend hohen Stand der wissenschaftlichen Arbeit im ZIB, die „sowohl in der Grundlagenforschung als auch bei der Umsetzung von Anwendungsproblemen zu spektakulären Ergebnissen in ganz unterschiedlichen Bereichen führt“. Zusammenfassend führte er aus:

„Durch seine wissenschaftlichen Erfolge ist das ZIB ein Aushängeschild für Berlin, das junge Wissenschaftler nach Berlin zieht und den Arbeitsmarkt durch Spin-Offs bereichert.“

Ende September konnte das ZIB einen weiteren spektakulären Erfolg verbuchen. Zusammen mit der Freien Universität gewann es (bei 96 Antragstellern und als einziger Antrag aus der Mathematik) eines der zehn vom Bundesministerium für Bildung und Forschung ausgeschriebenen Projekte der Förderinitiative „Forschungscampus – öffentlich-private Partnerschaft für Innovationen“. Hierdurch wird die langfristige Zusammenarbeit von ZIB und FU mit Industrieunternehmen mit rund 20 Mio. € gefördert.

Wir gehen trotz mancher finanzieller Engpässe zuversichtlich in das neue Jahr 2013. Wir sind stolz auf unsere hoch motivierten Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, auf die hervorragenden Forscherinnen und Forscher, die erneut vielfache wissenschaftliche Auszeichnungen erhalten haben. Auch im Jahr 2012 haben wir wiederum große, anspruchsvolle Forschungsprojekte eingeworben und zur Lösung wichtiger Fragen in der Mathematik und Informatik beigetragen. Wir sind entschlossen, den Weg, den wir eingeschlagen haben, gemeinsam erfolgreich und kraftvoll weiterzugehen.

Berlin, im April 2013



Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel
Präsident



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

INHALT

8	Executive Summary
10	Konrad Zuse – Der Namenspatron des ZIB
12	Peter Deuflhard und das ZIB
14	Das Zuse-Institut Berlin: „Schnelle Algorithmen – Schnelle Rechner“
16	Gliederung der Wissenschaftlichen Bereiche
18	Organisationsstruktur des ZIB
20	Wirtschaftliche Situation
21	Personelle Entwicklung
22	Organisation
25	Spin-Off Firmen
<hr/>	
28	NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG
32	Implantatdesign
34	Spurenstoffe im Trinkwasser
36	Optische Resonanzen in Nanostrukturen
38	Modellgestützte Medikation in der Reproduktionsmedizin
40	Projekte der Abteilung Numerische Analysis und Modellierung
<hr/>	
42	VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE
46	3D-Modellierung und visuelle Analyse von neuronalen Netzen
48	Anatomische 3D-Modelle aus Röntgenbildern für die individualisierte Therapieplanung
50	Antike Kontexte begreifbar machen – iPads im Pergamonmuseum
52	Projekte der Abteilung Visualisierung und Datenanalyse
<hr/>	
54	OPTIMIERUNG
58	Autobahnmautkontrolle
60	Robuste Kommunikationsnetze
62	Supply Chain Management
64	Mathematik in der Konferenzplanung
66	Projekte der Abteilung Optimierung
<hr/>	
68	WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION
72	Webtechnologie und Multimedia
74	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
76	digiS – Spartenübergreifende Beratungsstelle für Digitalisierungsprojekte
77	EWIG – Langzeitarchivierung von Forschungsdaten in den Geowissenschaften
78	Projekte der Abteilung Wissenschaftliche Information
79	Projekte der Abteilung KOBV
<hr/>	
80	PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME
84	Große Pattern Datenbanken für heuristische Suchverfahren
86	Modellierung von Transaktionen in Graphdatenbanken
88	MosGrid: Molecular Simulation Grid
90	Projekt Enhance: Heterogene Rechner einfacher erschließen
92	Projekte der Abteilung Parallele und Verteilte Systeme

94	SUPERCOMPUTING
96	Der HLRN-Supercomputer am ZIB
98	HLRN-Fachberatung
100	BRAIN – Das Berliner Wissenschaftsnetz

102	IT-SERVICE
104	IT-Service
106	Zentrale Datenhaltung im ZIB

108	FAKTEN UND ZAHLEN
111	Wissenschaftliche Nachwuchsförderung
112	Auszeichnungen und Rufe
113	Publikationen
123	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern und -Mitarbeiterinnen
137	Tagungen und Gäste am ZIB
140	Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit
141	Software und Service







ALLGEMEINER TEIL

EXECUTIVE SUMMARY

KONRAD ZUSE – DER NAMENSPATRON DES ZIB

PETER DEUFLHARD UND DAS 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

The Zuse Institute has, in its more than 25 years of existence, been driven by the ambition to reach high performance in whatever it does. In this period it has developed into an institution that combines research, development, and service in a unique way for the benefit of science, industry and society. The abbreviation ZIB has become an international trademark. Our colleagues, partners, and customers can be sure that we deliver.

Challenging applications from science and engineering, economy, or information technology are the focus of our research. We combine deep insights of mathematical methodology and powerful machinery of modern computer science to design and analyze algorithms theoretically and to provide implementations that stand the test of practice. Many projects funded by industry, DFG, BMBF, etc. are testimonials of our success. This work is done in ZIB's branches Numerical Mathematics, Discrete Mathematics, and Computer Science which are linked by professorships to FU, TU, and HU. ZIB is fully integrated in many collaborative research activities in Berlin, most notably in the DFG Research Center MATHEON and the Berlin Mathematical School. Several spin-off companies grew out of our activities. They provide exciting new jobs and transfer our research directly into industry.

We work hard to deliver top quality service in high performance computing on our fast computers to which only top scientists get access in case they pass the filter of our external Evaluation Committee. ZIB provides additional support by its internal „HPC pilots“ who help making best use of the HLRN computing power.

The last years have seen a significant growth of various IT-services for a broad scientific community. ZIB hosts the Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV), a consortium of all university, public and many other libraries in Berlin and Brandenburg and provides a large number of electronic services for librarians and library users. ZIB also operates 2,000 km of fiber cables that connect 150 locations of 45 scientific and cultural institutions in Berlin. ZIB offers various scientific information services, and in 2012, it was chosen to host the Berlin Service Center for Digitalization „digiS“

NUMERICAL MATHEMATICS

This area divides into the two departments „Numerical Analysis and Modelling“ and „Visualization and Data Analysis“ that concentrate on the modeling, simulation and optimization of complex systems from the life sciences, material sciences and optical technologies, and on the corresponding development of novel and effective methods for visual data analysis.

2012 was a year with many exceptional research highlights of which we can only report a few in detail: From the departments „Numerical Analysis and Modelling“ we focus on (A) the optimal design of implants and the underlying progress in PDE-constrained non-convex optimization problems, (B) on new techniques for detecting trace elements and their transformation products in the water cycle and for analyzing potential risks, (C) on a new finite-element code for reliable simulation and design of nano-optical devices with unrivalled efficiency, and (D) on the model-based optimal medication in reproduction medicine.

From the department „Visualization and Data Analysis“ we highlight (A) the construction of 3D-anatomy models based on clinical 2D-X-ray images and its application in medical diagnostics and therapy planning, (B) the full-complexity 3D-modelling and visual analysis of neuronal nets based on experimental image data for the somatosensory cortex of the rat, and (C) the iPad-based visual guide developed in ZIB that was successfully used in an exhibition of the Pergamon museum.

On May 9, the Executive Board of the Einstein Foundation established the new Einstein Center for Mathematics Berlin (ECMath) as the first center of its kind. The area Numerical Mathematics was strongly involved in the conceptual design of two of the Innovation Areas of ECMath, „Mathematics in Clinical Research“ and Health Care and Mathematics in Optical Technologies. A good example for the kind of research and knowledge transfer intended to take place in ECMATH is our spin-off company „1000Shapes“ that was granted the first Transfer Award of the DFG Research Center Matheon in May 2012.

DISCRETE MATHEMATICS

The two departments Optimization and Scientific Information of this area contribute to the progress and the promotion of scientific computing methods for the solution of difficult problems in technology and society. The year 2012 was extraordinarily successful with respect to the participation in and the acquisition of collaborative research endeavors.

On January 1, the new DFG Collaborative Research Center (SFB 1026) „Sustainable Manufacturing – Shaping Global Value Creation“ (Chair Prof. Seliger, TU Berlin) took off. Two mathematical projects in this Sonderforschungsbereich, A5 Multicriteria Optimization (a joint project with the combinatorics group at TU Berlin) and A6 System Dynamics, establish a strong link of the ZIB Optimization department into an exciting area in engineering.

On September 25, the BMBF granted to ZIB and its partner FU Berlin the Research Campus Mathematical Optimization and Data Analysis Laboratory (MODAL) as a part of the Hightech Strategy 2020 of the German Government. Three of the four labs of MODAL, the RailLab, the GasLab, and the SynLab, are „spin-offs“ of the respective research groups at our Optimization department. The advancement of MODAL will be a considerable future challenge.

This year we report in detail about the optimization of toll control tours, the design of robust telecommunication networks, methods for solving large-scale supply chain management problems and conference planning with integer programming.

The Scientific Information department supports a large number of libraries and museums and continues the development of its highly esteemed organizational and IT-services. This year we report about our web technology and multimedia activities, the KOBV (Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg) service and the development of work flow components for long term archiving. We are proud that the State of Berlin decided to locate its Service Center for Digitalization (digiS) at ZIB. This project started its pilot phase in October 2012 and has the task to coordinate and support digitalization efforts of cultural assets in Berlin.

COMPUTER SCIENCE

This area carries out research and service projects in the fields of high performance computing, data management, and wide area networks. It divides into the departments „Parallel and Distributed Systems“, „Supercomputing“, and „IT-Service“.

From the „Parallel and Distributed Systems“ department we selected three research highlights for this report. The first is perhaps the most impressive: We were able to build powerful heuristics, so-called pattern databases, for solving shortest path problems in explicitly defined graphs. Our pattern databases are two to three orders of magnitude larger than any previously published table. The second project is on the modelling of transactions in graph data-bases by graph transformation. It allows to check the consistency and to analyze extremely big data volumes, such as those collected by social networks. The third project is on complex computational workflows in quantum chemistry, molecular dynamics, and molecular docking in the German D-Grid. The fourth project aims at lowering the barriers for the use of energy-efficient graphics processors (GPUs). We developed a performance framework that predicts the runtime behavior of real-world applications for GPUs and thereby helps developers in porting their codes from CPUs to GPUs.

The „Supercomputing“ department spent much time and effort on the European procurement for the next HLRN supercomputer. In December 2012 we signed the contract with Cray and we are now eagerly awaiting the installation of the new Cray Cascade system in August 2013. The new system will be almost ten times as powerful as the current unit, although it will occupy only one fourth of the floorspace.

The „IT Service“ department extended in 2012 its archival storage capacity by installing new tape drives. Apart from the 5-fold increased data capacity, the new drives provide an end-to-end integrity check in order to avoid silent data corruption.

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 „Erfinderkunstwerkstatt“ auf. Er sammelte Geld von Freunden und in der Familie, um das Werkzeug und die Bauteile bezahlen zu können. Das Resultat war der 1938 fertig gestellte, zunächst noch vollmechanische, programmierbare Ziffernrechner Z1, der seine Befehle von Lochstreifen ablas. Erstmals verwendet er das binäre Zahlensystem, um die Programme zu steuern. Der Ingenieur Zuse verstand schon früh die Einheit von arithmetischen und logischen Operationen. Das Versuchsmodell Z1 war wegen der in der Praxis fehlenden Genauigkeit seiner mechanischen Bauteile jedoch nie funktionsfähig.

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

KONRAD ZUSE ALS UNTERNEHMER

1945 wurde die Z3 durch Bomben zerstört. Die zu diesem Zeitpunkt teilweise fertig gestellte Z4 war rechtzeitig von seinen Mitarbeitern zerlegt, verpackt und nach Süddeutschland, in ein Dorf im Allgäu, in Sicherheit gebracht worden. Dort besuchten ihn die Schweizer Mathematiker Eduard Stiefel und 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.

PETER DEUFLHARD UND DAS ZIB

Eine persönliche Sicht auf den langjährigen Präsidenten des ZIB, die besondere Qualität seines Wirkens und die Konsequenzen daraus

Christof Schütte, Peter Deuflhards Nachfolger im ZIB



◀ Zum Abschluss des zu seinen Ehren veranstalteten Wissenschaftlichen Kolloquiums „Mathematics in our changing world – How visions shape reality“ erhält Peter Deuflhard die goldene Ehrennadel der Freien Universität Berlin (FU) aus den Händen des Kanzlers der FU, Peter Lange.

Quelle: FU Berlin

Als Peter Deuflhard 1986 die Leitung des ZIB übernahm, begann eine neue Ära – nicht nur für das ZIB. Aus einer als Rechenzentrum mit Dienstleistungsaufgaben konzipierten Einrichtung entwickelte er das erste deutsche Forschungsinstitut für Scientific Computing, das „in der Summe der wissenschaftlichen Bemühungen in angewandter Mathematik und Informatik die Komplexitätsgrenze der auf Computern simulierten technischen Anwendungen möglichst weit vorschieben“ solle, so seine eigene Formulierung in seinem Konzeptpapier „Plädoyer für die Errichtung eines Zentrum für Scientific Computing“ aus dem Oktober 1984.

Das ist nun fast 30 Jahre her und das ZIB hat dieses Ziel durch das Wirken von Peter Deuflhard und seinen Mitstreitern in vielerlei Anwendungsfeldern immer und immer wieder erreicht und verfügt deshalb über höchste internationale Sichtbarkeit. Peter hat mit herausragenden wissenschaftlichen Erfolgen dazu beigetragen: Er leistete bahnbrechende Beiträge zur Numerischen Mathematik (für die Experten unter den Lesern seien Multiple Shooting, effiziente Integratoren für steife Differentialgleichungen, affin-invariante Newton-Verfahren, kaskadische Mehrgitterverfahren beispielhaft genannt), immer in Wechselwirkung mit neuen Anwendungsfeldern in Medizin, Polymerchemie, Verbrennung, Molekularforschung, Nanooptik und vielen anderen mehr. Das ist eine großartige Leistung, die in ihrer Breite in der Angewandten Mathematik in Deutschland vielleicht unerreicht ist.



Aber es ist meiner Ansicht nach nicht seine zentrale Leistung. Die liegt woanders: Zur Zeit der Gründung des ZIB hatte die Forschung in der angewandten Mathematik zum Ziel, den Anwendungswissenschaften mathematische Werkzeuge zur Lösung ihrer Probleme an die Hand zu geben. Peter und seine Mitstreiter schufen das moderne Profil der angewandten Mathematik, in der neben dem Erschaffen neuer Werkzeuge auch das ganz konkrete Lösen der Anwendungsprobleme in interdisziplinärer Kooperation mit den Anwendern zum Ziel gehört. Seine Arbeitsweise beruhte immer auf dem „Scheibenwischerprinzip“: Von der mathematischen Grundlagenforschung in die Anwendung, sehen wie weit man dort ganz konkret kommt und dann wieder zurück in die Grundlagenforschung und die wirklich passende mathematische Struktur hinter dem Anwendungsproblem suchen. Und das wieder und wieder, immer den Blick für den Weg zum Ziel freihaltend.

Mit dem ZIB hat Peter Deuflhard einen festen Raum geschaffen und immer wieder verteidigt, in dem der nachfolgenden Generationen von Forscherinnen und Forschern Zeit und Kraft für diesen intellektuell sehr fordernden Spagat zwischen Grundlagenforschung und konkreter Anwendung gegeben wurde. Hier konnten sie wachsen und ein Profil entwickeln, das international erfolgreich ist und überall auf der Welt Nachahmer findet. Die Liste seiner Schüler beweist das und die Liste der aus dem ZIB hervorgegangenen Wissenschaftler mit internationaler Reputation erst recht.

Darüber hinaus hat er es geschafft, diesem Raum ein sinnstiftendes Gebäude hinzuzufügen, das diesem Wirken eine Heimat und Zukunft gibt. Und er hat entscheidend mitgewirkt an der Errichtung des DFG-Forschungszentrums MATHEON, das ein Zusammenwirken der gesamten Angewandten Mathematik in Berlin unter dem Titel „Mathematik für Schlüsseltechnologien“ ermöglicht. Die Sichtbarkeit und Reichweite der anfänglich aus dem ZIB stammenden Philosophie der direkten Zusammenarbeit mit Anwendern und Industrie wurde nochmals deutlich gesteigert. Das ZIB selbst hat sich durch die Verknüpfung von Mathematik und Informatik, Hochleistungsrechnen und informationstechnischen Diensten für die Wissenschaft international als beispielgebende Einrichtung etabliert und zeigt, dass die im Spannungsfeld von Forschung, Anwendung und Dienstleistung entstehenden Konzepte zu nachhaltiger Innovation führen.

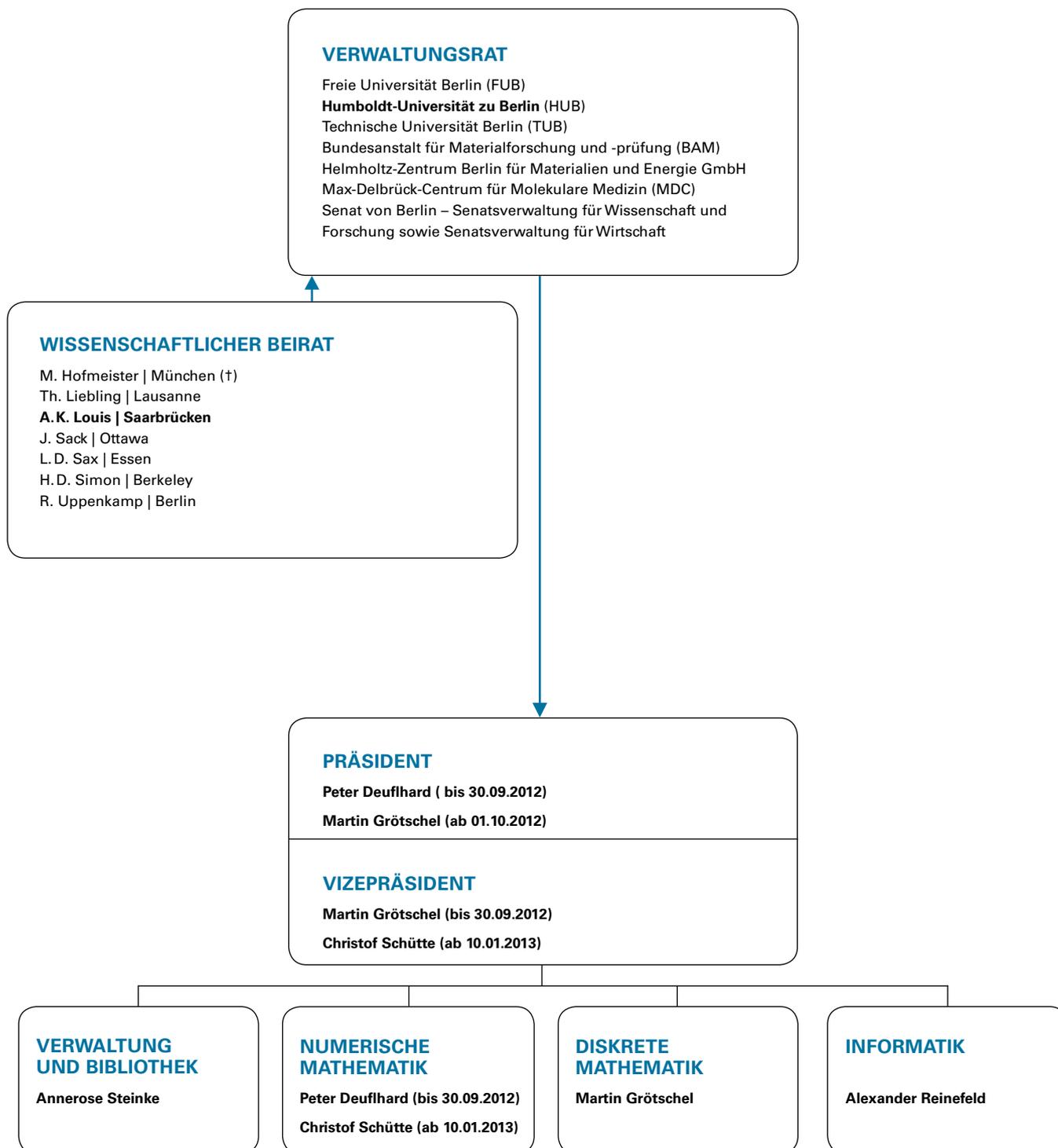
Das Wirken von Peter Deuflhard hat international höchste Anerkennung erfahren, zum Beispiel durch den hochkarätigen Maxwell-Preis der SIAM, der ihm 2007 für seine „originären, tief greifenden und unvergleichlichen Verdienste in der Angewandten Mathematik“ verliehen wurde oder die Ehrendoktorwürde der Universität Genf für seine „Pioniertätigkeit in der Numerischen Mathematik für gewöhnliche Differentialgleichungen“.

Nun geht der Lotse von Bord und wir, die nachfolgende Generation und natürlich insbesondere ich als sein Nachfolger im ZIB, werden die Erfolgsgeschichte zu neuen Ufern fortsetzen.

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

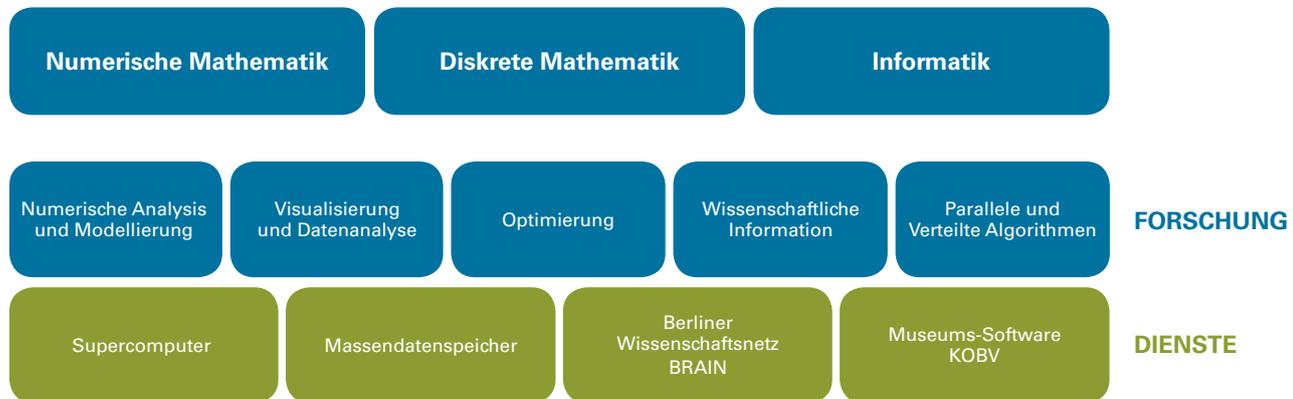
Das ZIB betreibt in Berlin im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen in Norddeutschland ein Hochleistungsrechnersystem. Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Die 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 Langzeit-speicherung. 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

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

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 „Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)“ und „Informationstechnische Werkzeuge für Museen“ sowie der „Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)“. In 2012 wurde außerdem die „Servicestelle Digitalisierung“ des Landes Berlin in der Abteilung eingerichtet.

INFORMATIK

Der Bereich Informatik untergliedert sich in die Abteilungen:

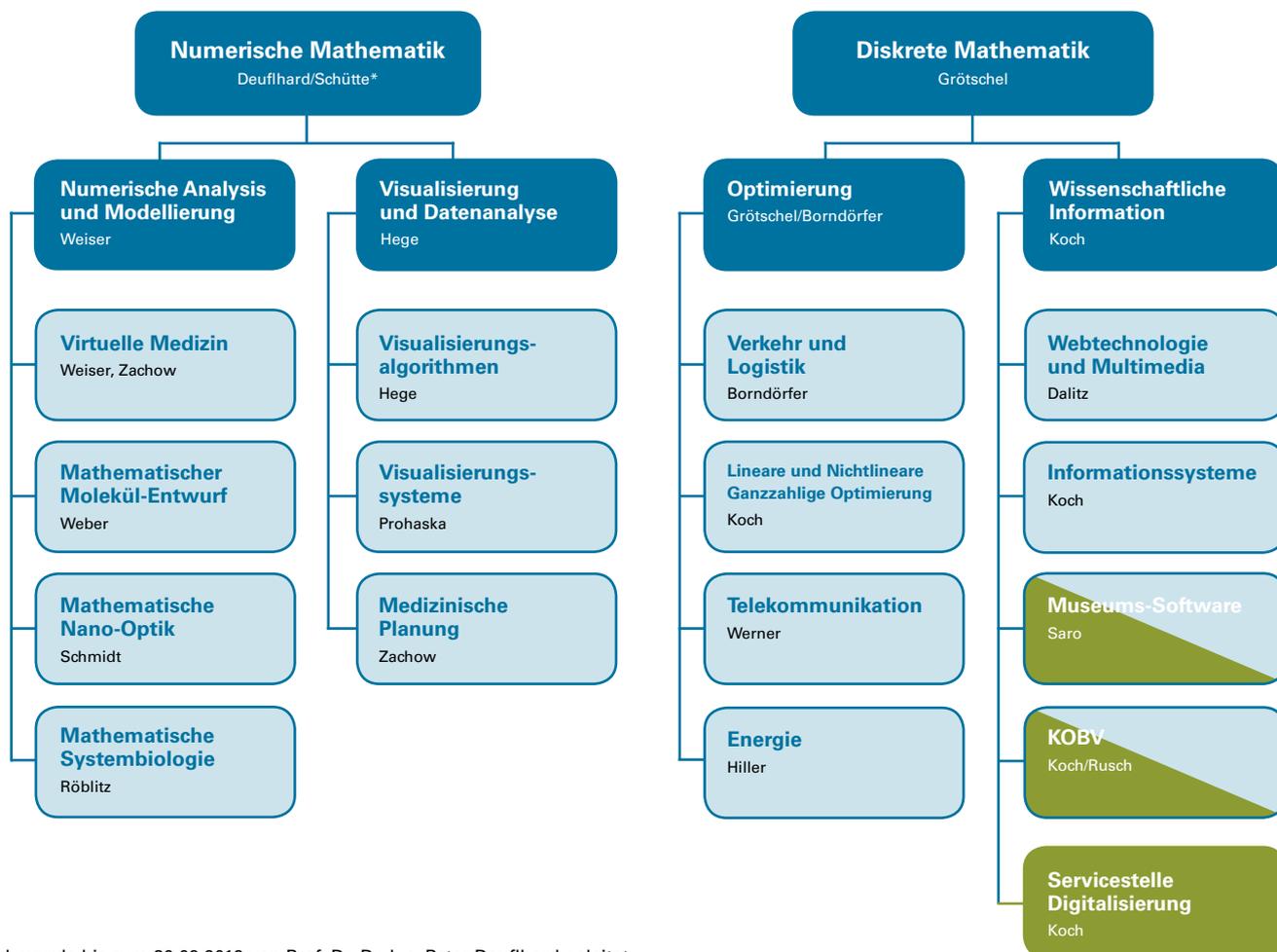
- Parallele und Verteilte Systeme
- Supercomputing
- IT-Service

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 C-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

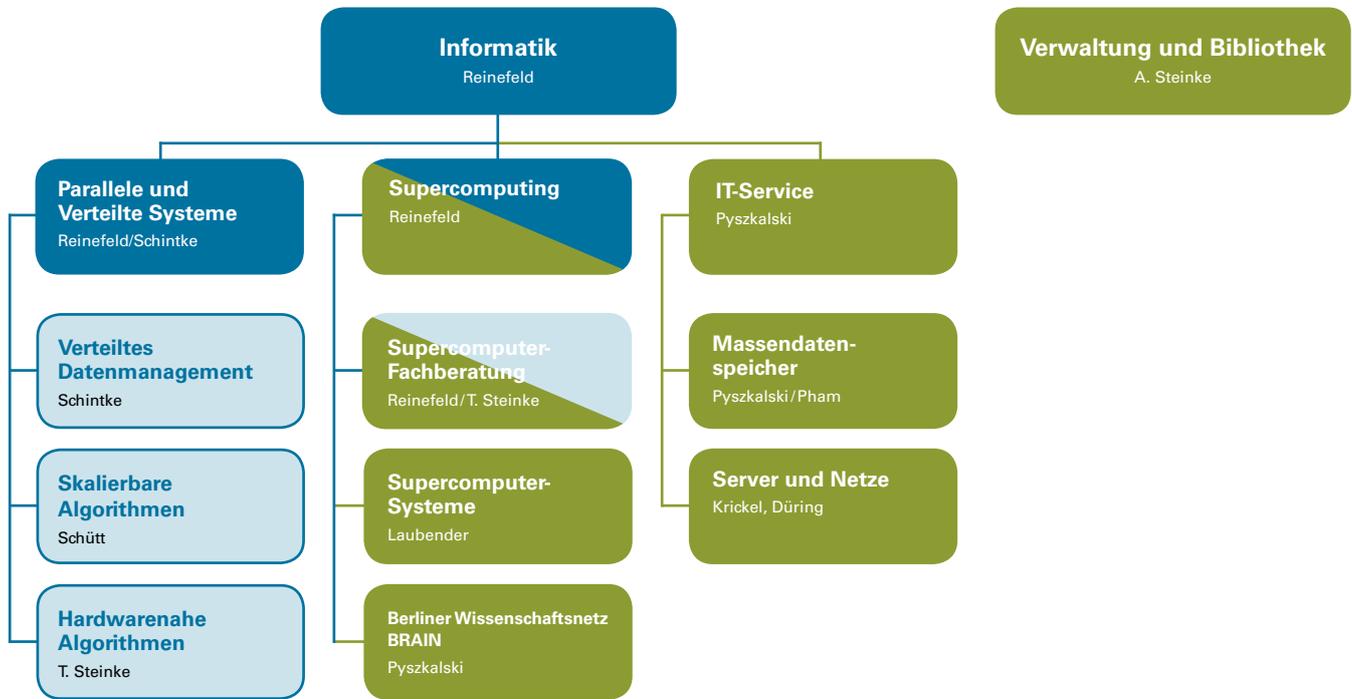


* Der Bereich wurde bis zum 30.09.2012 von Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard geleitet und steht ab 10.01.2013 unter der Leitung von Prof. Dr. Christof Schütte

AM ZIB ARBEITEN FORSCHUNG UND SERVICE ENG ZUSAMMEN.

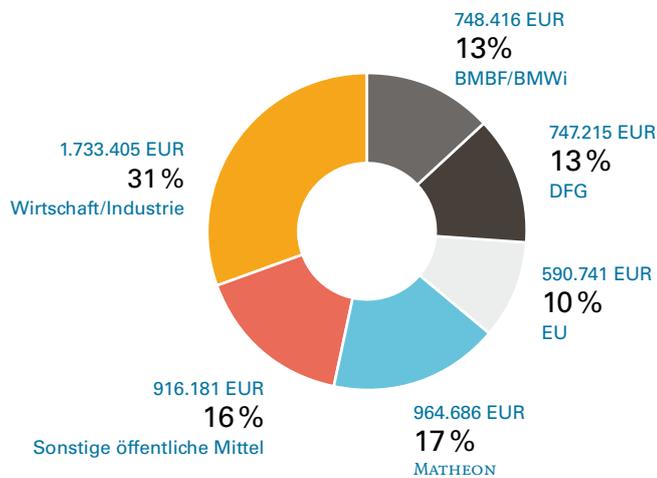
Im Jahr 2012 wurden die Abteilungen und Arbeitsgruppen der Bereiche entsprechend den aktuellen Forschungsschwerpunkten gegliedert.

- 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.

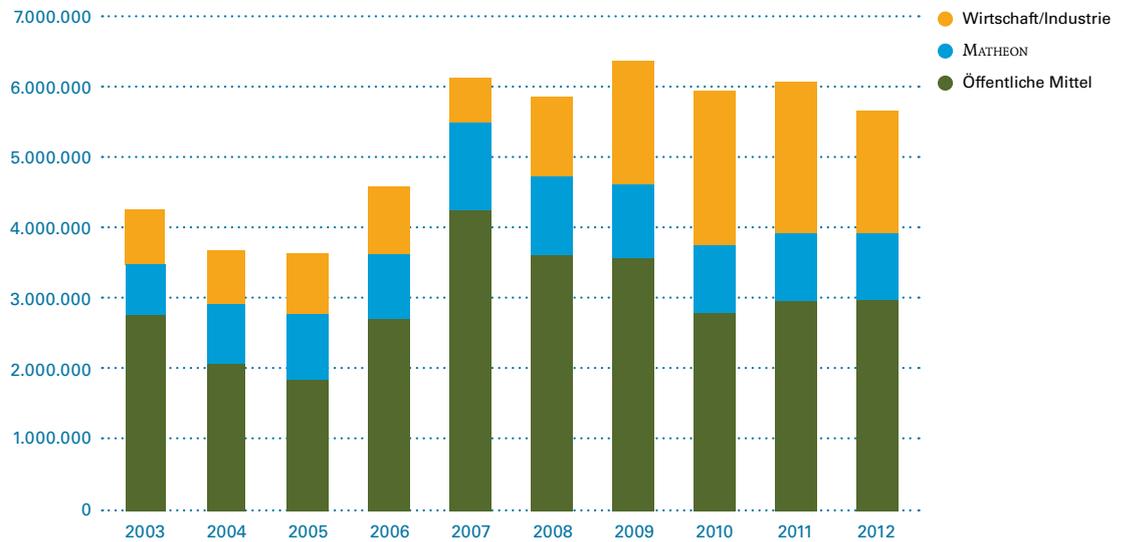
Auch im Jahr 2012 hat das ZIB eine Vielzahl von Drittmittelprojekten eingeworben. Die Finanzierung des Instituts aus öffentlich-rechtlichen projektbezogenen Drittmitteln blieb in etwa gleich, der Anteil der industriellen Drittmittelprojekte im Vergleich zum Vorjahr zurück. Die Industriemittel sind in wirtschaftlich schwierigen Zeiten in besonderem Maße Schwankungen unterworfen. Zudem verfügt das ZIB über keine Rücklagen mehr, die für die Anbahnung von Industrieprojekten notwendig sind. Trotzdem konnte das ZIB wieder interessante Forschungsprojekte akquirieren und bleibt ein gefragter Kooperationspartner für große und mittelständische innovative Unternehmen.

Der Personalbestand im ZIB ging im Berichtsjahr wegen der notwendigen Kosteneinsparungen infolge eines gesunkenen Zuschusses des Landes Berlin um 7,5% auf 218 Personen zurück, im Jahr 2011 arbeiteten 236 Personen am ZIB (234 Personen in 2010). Auch in 2012 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.

Der neue Hochleistungsrechner der Norddeutschen Länder HLRN-III wurde in 2012 ausgeschrieben, im Dezember 2012 wurde der Firma CRAY der Zuschlag erteilt. Im September 2013 wird der neue HLRN-III ans Netz gehen. Die langfristige Datenhaltung des Instituts wurde weiter ausgebaut, erfreulicherweise konnten zahlreiche neue Forschungsk Kooperationen mit Berliner Einrichtungen in diesem Bereich geschlossen werden.

Das Land Berlin bewilligte für 2012 einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss in Höhe von 6.978 T€ (ohne BRAIN und KOBV-Anteile), der investive Bereich des ZIB wurde mit 424 T€ unterstützt. Die Drittmiteleinahmen aus öffentlichen Projekten und aus Industrieprojekten in Höhe von 5.701 T€ in 2012 lagen um 416 T€ unter dem Niveau von 2011 (6.117 T€). Zurückzuführen ist dies vor allem auf einen Rückgang der Industriemittel, sie lagen in 2012 mit 1.733 T€ deutlich unter den Erträgen von 2011 (2.161 T€). Herausgerechnet und an dieser Stelle nicht erfasst wurden selbstverständlich alle Mittel, die im Zuge von Projektkooperationen an Forschungspartner weitergegeben wurden. Die Drittmiteleinahmen aus öffentlich geförderten Projekten blieben mit 3.967 T€ gegenüber 2011 (3.957 T€) konstant. Ein wichtiges Standbein waren wiederum die Projekte des DFG-Forschungszentrums MATHEON, das im Frühjahr 2014 auslaufen wird.

DRITTMITTELEINNAHMEN IN EUR:



PERSONELLE ENTWICKLUNG

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter in Höhe von 80,5 Stellen sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die deutlich über dem Durchschnitt liegende Altersstruktur im Bereich der unbefristet beschäftigten Belegschaft sowie die Anpassungen des TV-L und die jährlichen Tarifsteigerungen besteht im Personalhaushalt eine besondere finanzielle Belastung, die auch 2012 durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmiteleinahmen abgedeckt werden musste.

Im Jahr 2012 wurden 218 Personen am ZIB beschäftigt. Finanziert wurden die zusätzlichen Mitarbeiter/innen über Drittmittelprojekte.

ZAHL DER BESCHÄFTIGTEN ZUM 01.01.2013 IM VERGLEICH ZUM VORJAHR:

	01.01.12 davon			01.01.13 davon		
	gesamt	unbefristet	befristet	gesamt	unbefristet	befristet
Leitung	4	4	0	4	4	0
Wissenschaftler	107	19	88	102	19	83
Service-Personal	47	39	8	45	37	8
KOBV-Zentrale	15	7	8	16	7	9
Student. Hilfskräfte Auszubildene	63	0	63	51	0	51
Total	234	67	167	218	67	151

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 war Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuflhard bis zum 30.09.2012, Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel ab 01.10.2012.

Als Vizepräsident amtierte Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel bis zum 30.09.2012, Prof. Dr. Christof Schütte ab 10.01.2013.

Der Verwaltungsrat setzte sich 2011 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Peter Frensch, HUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Paul Uwe Thamsen, TUB, stellvertretender Vorsitzender
- Prof. Dr. Brigitta Schütt, FUB
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Forschung
- N.N. Senatsverwaltung für Bildung, Jugend und Wissenschaft
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Anke Kaysser-Pyzalla, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
- Prof. Dr. Nikolaus Rajewsky, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 14.02.2012, am 04.07.2012 und am 28.11.2012.

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, USA
- Dr. Reinhard Uppenkamp, Berlin Chemie AG, Berlin

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 24. und 25.09.2012 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
- IDW – 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 2012 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 Signalanalyse in der Meteorologie

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

Prof. Dr. Thomas Wolf (Brock University, Ontario, Canada)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen;
symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie; parallele Verfahren in der
Computer Algebra; Mitglied des kanadischen Supercomputer-Verbunds SHARCNET

SELBSTVERWALTUNG

Der Personalrat setzte sich vom 01.01.2012 bis zum 08.11.2012 wie folgt zusammen:

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

Am 08.11.2012 fanden im ZIB Personalratswahlen statt. Am 09.11.2012 begann die Amtsperiode des neu gewählten Personalrats, die konstituierende Sitzung fand am 19.11.2012 statt.

- Wolfgang Dalitz (Vorsitzender)
- Marlies Engelke (Stellvertretende Vorsitzende)
- Susanne Gottwald
- Marika Karbstein
- Oasama Bach
- Dirk Krickel
- Dr. Stefan Zachow

FRAUENVERTRETUNG

- Uta Kaminsky (bis 13.11.2012)
- Kathrin Peter (bis 31.10.2011)

Im November 2012 fanden ebenfalls Wahlen zur Frauenvertretung statt. Ab 14.11.2012 wird die Frauenvertretung wahrgenommen von:

- Meike Winderlich (Frauenvertreterin)
- Julia Goltz (Stellvertretende Frauenvertreterin)

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 GmbH | 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

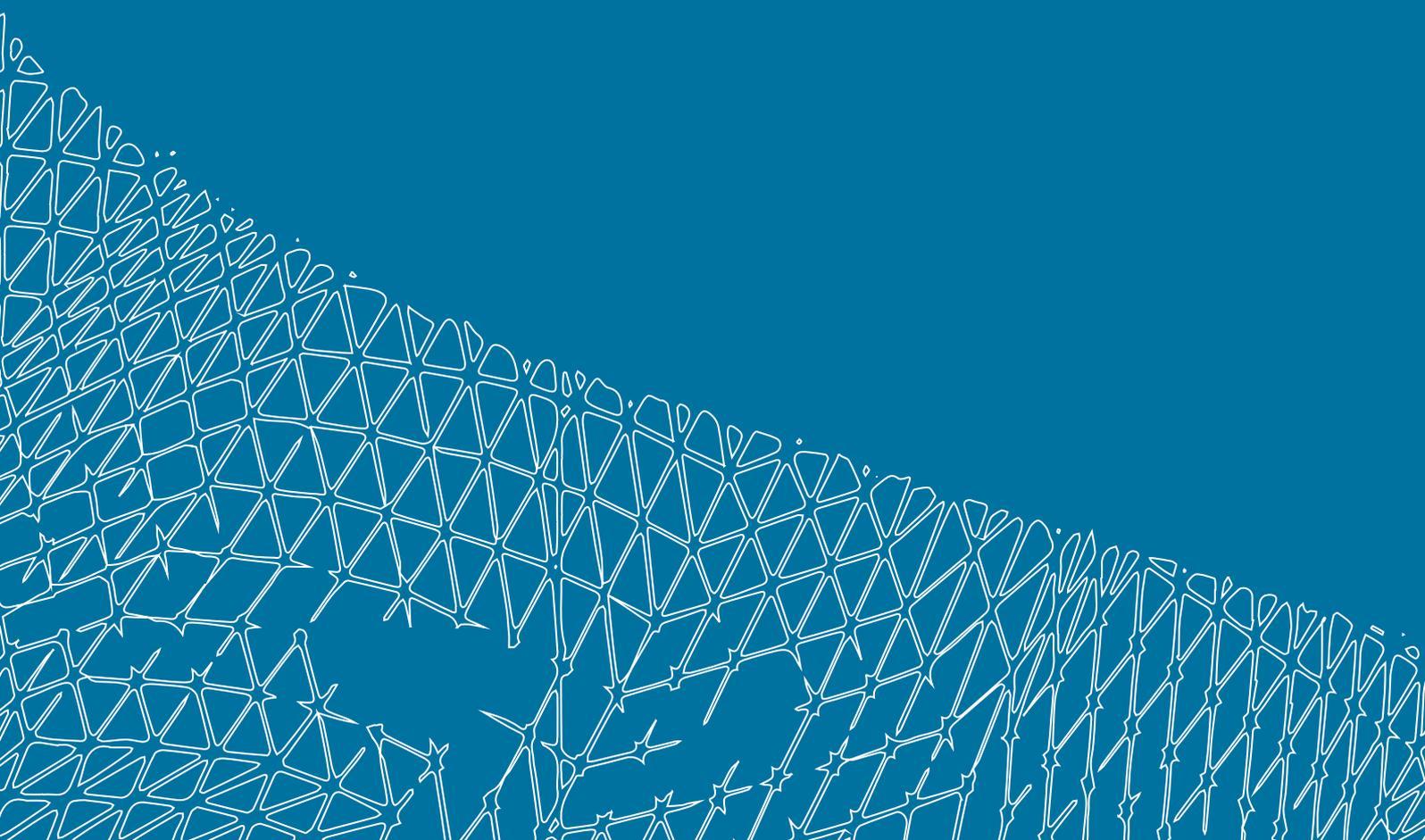
IT-SERVICE





NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

Numerische Mathematik für komplexe Systeme



NUMERISCHE ANALYSIS UND MODELLIERUNG

Leitung: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deußhard, 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 sowie die numerische Simulation (oft auch „numerische Modellierung“ genannt) im Anwendungskontext umfasst.

STRUKTUR

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

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

AUSZEICHNUNGEN UND RUF

F. Schmidt wurde zum Honorarprofessor an der Freien Universität Berlin ernannt. P. Deußhard erhielt einen Ruf an die King Abdullah University of Science and Technology, Saudi Arabien und die Ehrenprofessur der Beijing University of Technology.

VIRTUELLE MEDIZIN

Das im Berichtszeitraum ins Englische übersetzte Lehrbuch „Adaptive Numerical Solution of PDEs“ ist im September 2012 als DeGruyter Textbook erschienen. Für semi-infinite Optimalsteuerungsprobleme konnte lokale Selbstkonsistenz spezieller rationaler Barrierefunktionen nachgewiesen werden. Dies impliziert lineare Konvergenz entsprechender Innere-Punkte-Methoden für die in der Praxis häufig auftretenden Optimierungsprobleme mit endlichdimensionaler Steuerung. Für die Formoptimierung von Knochenimplantaten wurden adaptive Composite-Step-Verfahren und glatte Geometriedarstellungen zur Vermeidung künstlicher Eckenverfeinerungen entwickelt. Unsere Arbeiten an der Kompression von Trajektorien wurden auf die Defibrillation des Herzens (AG Kunisch, Graz) angewendet, wofür die adaptive Wahl der Quantisierungstoleranz auf nichtlineare Gleichungen und Newton-CG-Verfahren erweitert werden konnte. Die Methodik wurde zudem auf die Kompression von Molekültrajektorien übertragen, wobei bessere Kompressionsraten als in der Literatur erzielt werden konnten. Gemeinsam mit der Charité (AG Vajkoczy) wurde eine Hirndurchblutungssimulation zur Entscheidungsunterstützung und Planung von Bypassoperationen entwickelt.

MATHEMATISCHER MOLEKÜL-ENTWURF

Im Berichtszeitraum wurden im Rahmen unseres Projektes im SFB-765 die kinetischen Modelle für multivalente Bindungsvorgänge von Liganden an Rezeptoren mathematisch neu durchdacht. Dabei liefert die Konformationsdynamik mit „weichen“ Zugehörigkeitsfunktionen einen Schlüssel für ein tieferes Verständnis und ein neuartiges mathematisches Modell multivalenter Bindungsvorgänge. Bei der Entwicklung eines „nebenwirkungsfreien“

starken Schmerzmittels haben erste Tierversuche die Richtigkeit der von uns vorhergesagten Wirkstoffeigenschaften für den im ZIB am Rechner konstruierte Arzneistoff gezeigt. Die neue Ausgründung mathPharm GmbH soll das aus diesen Forschungen resultierende Wirkstoffpatent in Zukunft vermarkten. Bei der Analyse der Toxizität von Transformationsprodukten von Spurenstoffen im Wasserkreislauf (BMBF-Verbundprojekt TransRisk) konnten unsere Computersimulationen erfolgreich ein Transformationsprodukt eines Antibiotikums identifizieren, das ersten Experimenten zu Folge eine stärkere Wirkung als dessen Muttersubstanz aufweist. Das Forschungsthema „Risikocharakterisierung von Spurenstoffen im Wasserkreislauf“ soll in Zukunft im ZIB in größerem Rahmen betrieben werden.

MATHEMATISCHE NANO-OPTIK

Im Berichtszeitraum wurde unser Schwerpunkt Green Photonics, insbesondere Photovoltaik und Entwicklung energiesparender organischer LEDs, weiter ausgebaut. Im Bereich Photovoltaik haben wir uns wie schon im Vorjahr auf die Optimierung von Silizium-Dünnschichtzellen mit Tandemstruktur konzentriert. Im Verbundprojekt DEMO14 wurden erneut wesentliche Fortschritte insbesondere in der Modellierung rauer Oberflächen und der Analyse spezieller funktionaler optischer Komponenten (balancierte Zwischenreflektoren) erzielt. Darüber hinaus arbeiten wir bereits an neuen, innovativen Konzepten, die auf sogenannten Nanostrahlen beruhen. Die zugehörige Kooperation mit dem HZB (AG Rech, AG Stannowski, AG Schmid), dem Verbund PVcomB und dem MPI für Physik des Lichts (AG Christiansen) werden zunehmend intensiver und umfangreicher.

Neben diesem Schwerpunktthema wurden die Arbeiten zur Computational Geometry mit Anwendungen in der Photovoltaik (ETH Zürich, AG Norris) und Bereich optische Metamaterialien fortgesetzt. Unser Projekt im SFB 787 „Halbleiter-Nanophotonik“ hat eine Reihe neuer Kooperationsprojekte zum Thema optische Resonatoren initiiert. Dabei spielt zunehmend auch die Entwicklung neuer Materialmodelle, die quantenoptischen Effekten Rechnung tragen, eine wichtige Rolle.

MATHEMATISCHE SYSTEMBIOLOGIE

Im Jahr 2012 hat sich der Anwendungsschwerpunkt auf die Modellierung chemischer Reaktionsnetzwerke in der biotechnologischen Messtechnik verschoben. So konnte z. B. die Kooperation mit der Firma aokin, Hersteller eines Fluoreszenz-Polarimeters zur Toxin-Bestimmung in Lebensmitteln, ausgebaut werden und erste, sehr erfolgversprechende Untersuchungen zu Wiederbindungseffekten an Sensoroberflächen in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut für Biomedizinische Technik in Potsdam-Golm und der Firma Förster-Technik GmbH Engen durchgeführt werden. Diese Projekte sollen 2013 fortgesetzt und deutlich intensiviert werden. Im Bereich der endokrinen und metabolischen Netzwerke wurde auf Grundlage von Fütterungsversuchen, die von der FU Veterinärmedizin durchgeführt wurden, ein Modell zum Kaliumstoffwechsel bei Kühen entwickelt, welches Anknüpfungspunkte zur Diabetesforschung beim Menschen bietet. Darüber hinaus wurden weitere Schritte unternommen, unser Modell des weiblichen Hormonzyklus (GynCycle) in die klinische Praxis zu übertragen. Dieses Ziel wird in Kooperation mit Medizinern, Biologen und Informatikern im Rahmen eines EU-Projektes weiter verfolgt.

IMPLANTATDESIGN

Bearbeitet von: Sebastian Götschel, Lars Lubkoll, Martin Weiser, Stefan Zachow

Kooperation: R. Ewers (MU Wien, Klinik f. Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie), Z. Zinser (U Köln, Klinik f. Mund-, Kiefer- und Plastische Gesichtschirurgie), H. Sailer (Zürich, Ästhetische Gesichtsch-, Kiefer- und Oralchirurgie), A. Schiela (TU Berlin)

Förderung: DFG Forschungszentrum MATHEON (Projekt A17)

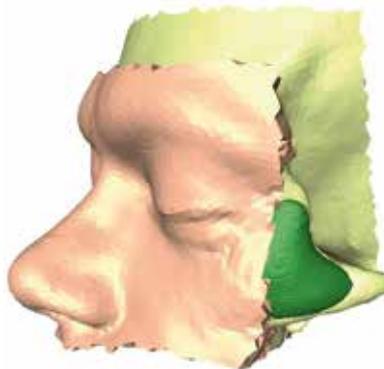
Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/jb/implantatdesign

Sind im menschlichen Körper Knochen fehlgebildet oder stark beschädigt, so müssen diese durch ein Implantat ersetzt oder ergänzt werden. Dabei kann, insbesondere im Gesicht, die Form des Implantats einen wesentlichen Einfluss auf das Erscheinungsbild des Patienten haben. Die Bestimmung der Implantatform wird gegenwärtig vom Chirurgen manuell anhand medizinischer Bilddaten durchgeführt. Die Form des Implantats ist somit von der Erfahrung des behandelnden Arztes abhängig. Dabei ist es dem Arzt in vielen Situationen nicht möglich, das komplexe Verhalten biologischen Weichgewebes intuitiv korrekt zu erfassen. Auch die Abschätzung des postoperativen Erscheinungsbilds ist nur in sehr eingeschränktem Maße möglich.

Eine automatisierte Bestimmung der Implantatform erlaubt es, in diesen Punkten deutliche Verbesserungen zu erreichen. Ziel unserer Arbeit ist deshalb die Entwicklung eines Algorithmus, der aus der gewünschten Gesichtsform und unter Berücksichtigung vom Arzt gewählter Einschränkungen eine optimale Implantatform berechnet.

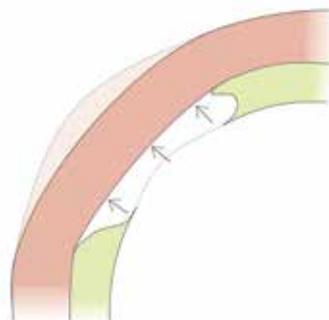
Der erste Schritt ist die Quantifizierung der Unterschiede zwischen verschiedenen Gesichtsformen. Da die Formwahrnehmung des Menschen ganz wesentlich durch die Beleuchtungssituation bestimmt wird, wurde ein Abstandsmaß entworfen, welches auf der Basis von Beleuchtungsmodellen gemittelte Helligkeitsunterschiede bewertet.¹ Dadurch wird der Formunterschied im Wesentlichen durch den Verschiebungsgradienten auf der Oberfläche bestimmt, was allerdings zu stärkerer Nichtkonvexität des Problems führt.

Die direkte Formulierung des Formoptimierungsproblems führt wegen des Kontakts zwischen Weichgewebe und Implantat auf ein MPEC (mathematical program with equilibrium constraints) mit globaler Nichtdurchdringungsbedingung, das mathematisch sehr schwierig zu behandeln ist.



◀ Abb. 1:
Jochbeinimplantat (grün) mit Weichgewebe und darunterliegendem Knochen.
(Koop. MU Wien)

Aus diesem Grund wurde eine formal äquivalente Formulierung entwickelt, in der die vom Implantat auf das umliegende Weichgewebe ausgeübte Normalkraft als Optimierungsvariable verwendet wird. Dies führt auf ein einfacheres, steuerungsbeschränktes Optimierungsproblem, wobei die Implantatform retrospektiv durch die Weichgewebeverschiebung gegeben ist (Abb. 2).



◀ Abb. 2:
Die Form des Implantats wird retrospektiv aus der Weichgewebeverschiebung bestimmt.

¹J. Bondzio: **Goal-oriented error estimation and an adapted cost functional on a numerical simulation of facial implants.** Diplomarbeit FU Berlin, 2011



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Die Form von Knochenimplantaten bestimmt wesentlich das Erscheinungsbild des Patienten. Wir bestimmen die optimale Implantatform aus der Vorgabe einer angestrebten Gesichtsform. Dies führt auf nichtkonvexe Optimierungsprobleme mit nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen als Nebenbedingung. Dafür werden quantitative Modelle sowie effiziente und robuste Algorithmen entwickelt.

Diese Formulierung berücksichtigt sowohl, dass das Weichgewebe über das Implantat gleiten kann, so dass keine Tangentialkräfte wirken, als auch, dass keine Hohlräume zwischen Implantat und Weichgewebe auftreten sollen.

Realistische hyperelastische Materialmodelle für Weichgewebe führen auf nichtlineare, nichtkonvexe Gleichungsnebenbedingungen. Aufgrund fehlender Regularität ist sehr wenig über die Struktur von Lösungen bekannt. Dennoch konnte für ein leicht vereinfachtes Problem die Existenz einer global optimalen Lösung gezeigt werden.²

erfassen und so eine adaptive Steuerung von Schrittweite und Gitterverfeinerung erlauben. Die iterative Berechnung des Tangentialschritts mit projizierten CG-Verfahren erfordert in jeder Iteration die Lösung einer partiellen Differentialgleichung. Um die Effizienz zu gewährleisten, wurde die Verwendung schneller approximativer Löser und deren Auswirkung auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Composite-Step-Verfahrens untersucht.⁴

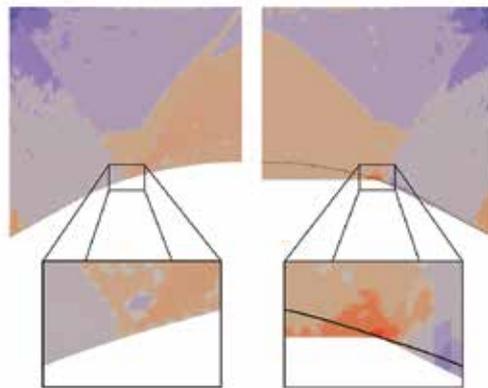
Zur effizienten Bewertung und Reduktion von Diskretisierungsfehlern wurden zielorientierte Fehlerschätzer entwickelt, die eine möglichst genaue Abschätzung der tatsächlichen Auswirkung auf die Gesichtsform erlauben.⁵ Anders als bei bisher publizierten zielorientierten Fehlerschätzern werden Diskretisierungsfehler der Verschiebung ausschließlich durch ihre Auswirkung auf die Implantatform bewertet, wodurch größere Gitter verwendet werden können.

Adaptive Gitterverfeinerung führt jedoch bei Geometrien, welche durch planare Dreiecke gegeben sind, zu einer starken Verfeinerung an einspringenden künstlichen Ecken (Abb. 3). Um diesen Effekt zu minimieren, wird mittels Hermiteinterpolation eine Approximation der glatten Geometrie bestimmt. Im Laufe der adaptiven Gitterverfeinerung wird dann diese Näherung durch die Verschiebung neuer Randknoten bestmöglichst approximiert. Neben dem Effizienzgewinn wird auf diese Weise auch die Lösungsgenauigkeit durch eine bessere Geometriedarstellung erhöht.

In Zusammenarbeit mit den klinischen Partnern⁶ in Wien und Zürich werden die in verschiedenen Fällen – Jochbein-, Orbita- und Kieferimplantate – patientenspezifisch ermittelten Implantatformen analysiert und evaluiert.

Abb. 3: ►

Hermite-Interpolation zur glatten Geometriedarstellung vermeidet künstliche Gitterverfeinerung.



Zur numerischen Lösung des Optimalsteuerungsproblems innerhalb der Finite-Elemente-Bibliothek **Kaskade 7**³ wird ein effizientes und robustes Composite-Step-Verfahren entwickelt, das affin-konjugierte Newtonverfahren auf beschränkte Optimierungsprobleme verallgemeinert. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der Konstruktion berechenbarer Schätzer, die die auftretenden Nichtlinearitäten im Zielunktional und in der Gleichungsnebenbedingung unter Erhalt der Invarianzstruktur

²L. Lubkoll, A. Schiela, M. Weiser: **An optimal control problem in polyconvex hyperelasticity**. ZIB-Report 12-08, 2012 ³S. Götschel, M. Weiser, A. Schiela: **Solving Optimal Control Problems with the Kaskade 7 Finite Element Toolbox**. In A. Dedner, B. Flemisch, R. Klöforn: *Advances in DUNE*. pp. 101-112, Springer, 2012 ⁴F. Lehmann: **Inexaktheit in Newton-Lagrange-Verfahren für Optimierungsprobleme mit elliptischen PDGL-Nebenbedingungen**. Diplomarbeit FU Berlin, 2013 ⁵M. Weiser: **On goal-oriented adaptivity for elliptic optimal control problems**. *Opt. Meth. Softw.*, angenommen ⁶M.J. Zinser, S. Zachow, H.F. Sailer: **Bimaxillary „rotation advancement“ procedures in patients with obstructive sleep apnea: a 3-dimensional airway analysis of morphological changes**

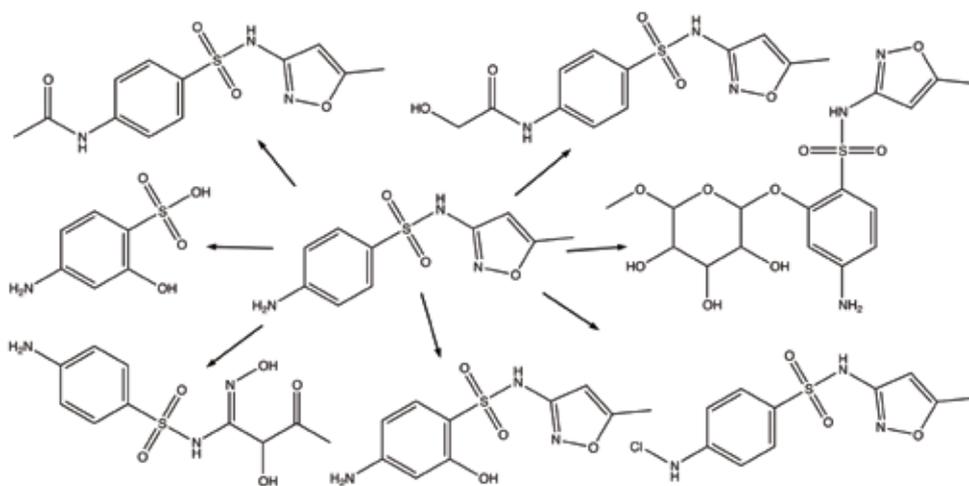
SPURENSTOFFE IM TRINKWASSER

Bearbeitet von: Vedat Durmaz, Jan-Martin Josten, Olga Scharkoi, Marcus Weber

Finanziert durch: TransRisk (BMBF-Ausschreibung RiSKWa), Bundesanstalt für Materialforschung (BAM)

Kooperationen: H. Mückter, J. Meyer (LMU München), C. Piechotta, S. Schmidt, R. Becker (BAM)

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/numerik/cmd/projekte/projektetails/article/transrisk.html



◀ Abb. 1:
Einige der nachgewiesenen Transformationsprodukte des Antibiotikums Sulfamethoxazol (Mitte).

Routinemäßig werden in Abwasserklär- und in Trinkwasseraufbereitungsanlagen eine Reihe von Stoffkonzentrationen gemessen. Die dabei zu messenden Stoffe (z. B. Arzneistoffe) sind teilweise gesetzlich vorgegeben. Die Differenz aus der eingeleiteten Stoffkonzentration und der Konzentration im Ablauf zeigt das entsprechende Abbauverhalten an. So zumindest ist die Theorie. Tatsächlich jedoch ist ein Stoff nicht unbedingt „abgebaut“ (sprich: mineralisiert) worden, wenn er im Ablauf nicht mehr gemessen werden kann. Die eingeleiteten Chemikalien können sich auch einfach in andere Stoffe umgewandelt haben – sogenannte Transformationsprodukte (TPs) sind entstanden (siehe Abb. 1).

In der RiSKWa-Ausschreibung des BMBF (Risikomanagement von neuen Schadstoffen und Krankheitserregern im Wasserkreislauf) geht es unter anderem darum, das Risikopotential die-

ser TPs abzuschätzen, dieses Risiko der Öffentlichkeit zu kommunizieren und entsprechende Maßnahmen einzuleiten. Besonderes Augenmerk wird dabei auf ökotoxikologische Fragestellungen gelegt, da vor allem das aquatische Ökosystem mit den TPs in Kontakt kommt. Das ZIB beteiligt sich an dem Projekt TransRisk, indem es das (human)toxikologische Potential der TPs mit rechnergestützten Methoden vorhersagen will. Da die Stoffe in nur extrem geringen Konzentrationen vorkommen, sind keine akuten Effekte zu erwarten. Hingegen unterliegen einerseits Langzeiteffekte, die sich zum Beispiel durch Auswirkungen auf den Hormonhaushalt des Menschen ergeben, unserer besonderen Aufmerksamkeit. Andererseits könnte es bei Arzneistoffen im Sonderfall dazu kommen, dass ein Stoff nach der Transformation wirksamer wird als seine „Muttersubstanz“ und daher auch in niedrigen Dosen Effekte auslöst. Beide Szenarien lassen sich dadurch



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Durch Industrie, Landwirtschaft und Haushalte gelangen Chemikalien in den Wasserkreislauf. Diese werden in technischen oder natürlichen Prozessen abgebaut und/oder in andere Stoffe transformiert, die dann in sehr geringen Dosen teilweise auch ins Trinkwasser gelangen. Die Transformationsprodukte stellen aufgrund ihrer geringen Konzentration noch keine Bedrohung dar, werden daher wenig untersucht, sollen jedoch jetzt in das Trinkwasser-Risikomanagement mit aufgenommen werden. Wir entwickeln rechnergestützte Methoden zur Ermittlung des Gefahrenpotentials in silico.

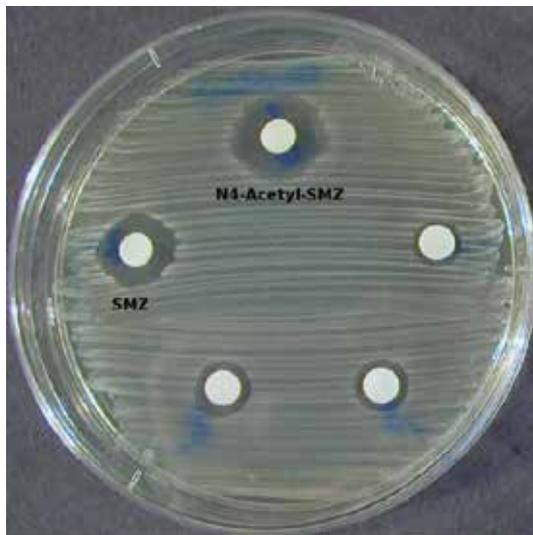
erklären, dass der transformierte Stoff auf bestimmte (humane) Rezeptoren einwirkt. Dazu müsste er zumindest eine hohe Affinität zu dem entsprechenden Rezeptor aufweisen. Diese Affinitäten lassen sich durch molekulare Simulationen abschätzen.

In einer Kooperation mit der BAM, die die entsprechenden Laborexperimente durchgeführt hat, haben wir bereits erfolgreich (mit hoher Korrelation) mit Hilfe des Linearen Interaktionsmodells die Bindungsaffinitäten (ΔG) von TPs an den humanen Östrogenrezeptor vorhersagen können¹. Die Simulationsrechnungen dazu sind aufwendig und wurden auf dem HLRN durchgeführt. Der Aufwand ist jedoch gerechtfertigt, da der Vergleich mit einfachen

Dockingmethoden deutlich schlechtere Korrelationen lieferte². Bei dem Östrogenitätsprojekt konnten wir das Lineare Interaktionsmodell mit Labordaten trainieren. Im Falle des Antibiotikums SMZ konnten wir auch ohne Labordaten ein TP identifizieren, das potentiell wirksamer ist als das SMZ selbst. Die prinzipielle Wirksamkeit dieses TPs wurde in einem späteren Laborexperiment belegt (Abb. 2). Neben der Affinität von bereits bekannten TPs wollen wir auch die biotische Transformation von Stoffen vorhersagen und möglicherweise bisher nicht-identifizierte TPs ermitteln. Dazu hat es bereits Vorarbeiten mit der BAM gegeben, in denen es um die Identifikation von Cytochrom-P450-basierten TPs ging. Auch hier wurden rechnergestützte Methoden genutzt^{3,4}.

Abb. 2: ►

Agardiffusionstest zur Untersuchung der Wachstumshemmung von *Staphylococcus aureus* durch Sulfamethoxazol und ausgewählten Transformationsprodukten.



¹V. Durmaz, Ch. Piechotta, S. Schmidt, P. Sabri, M. Weber: **A hands-off linear interaction energy approach to binding mode and affinity estimation of estrogens.** In prep ²J.-M. Josten: **Östrogenitätsapproximation mittels physikochemischem Oberflächenvergleich.** Masterarbeit Bioinformatik, FU Berlin 2012 ³O. Scharkoi, S. Esslinger, R. Becker, M. Weber, I. Nehls: **Predicting sites of cytochrome P450-mediated hydroxylation applied to CYP3A4.** Submitted for publication ⁴O. Scharkoi, S. Esslinger, R. Becker, M. Weber, I. Nehls: **Phase I oxidation of alpha- and gamma-hexabromocyclododecane by cytochrome P450 enzymes: simulation of the stereoisomerism of hydroxylated metabolites.** Organohalogen Compounds, 73:730-733, 2011

OPTISCHE RESONANZEN IN NANOSTRUKTUREN

Bearbeitet von: Sven Burger, Maria Rozova, Lin Zschiedrich, Frank Schmidt

Kooperationen: A. Knorr, S. Reitzenstein (TU Berlin), U. Bandelow (WIAS)

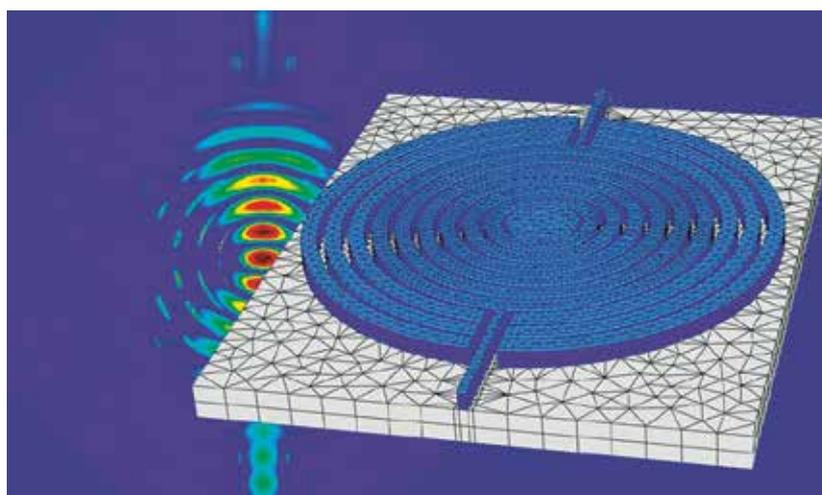
Förderung: SFB 787 Halbleiter-Nanophotonik

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/jb/resonatoren

Eine der wichtigen Eigenschaften des Lichts ist es, in geeigneten Strukturen Resonanzen auszubilden. Solche Strukturen werden Kavitäten genannt, und es ist eine Aufgabe der Mathematischen Nanooptik, für eine Vielzahl von verschiedenen Anwendungszwecken geeignete Kavitäten zu dimensionieren und zu optimieren. Einige der Anwendungsgebiete für optische Resonatoren sind Halbleiterlaser¹, LEDs², Frequenzfilter für nachrichtentechnische Komponenten, Biosensoren und Lichtfallen in Solarzellen. Aus numerischer Sicht besteht die Herausforderung vor allem darin, die gewünschten Resonanzzustände aus der Menge von oft vielen tausend möglichen Zuständen zu identifizieren und mit der gewünschten und erforderlichen Genauigkeit zu berechnen. Der Gitterresonator in Abb.1 besitzt eine sehr große optische Güte. Das bedeutet, dass das Licht im Resonanzzustand viele tausend Male im Resonator schwingt und dabei kaum mit dem Außenraum interagiert, während bei einer Wellenlänge, die nur ein Tausendstel

neben der Resonanzwellenlänge liegt, überhaupt keine Resonanz mehr festzustellen ist.

Eine vollkommen andere Technik der Realisierung von Kavitäten zeigt Abb. 2. Hier wird der Resonator durch eine geeignete periodische Anordnung von Löchern erzeugt. Das periodische Locharray besitzt eine optische Bandstruktur. Das bedeutet, dass es Wellenlängenbereiche gibt, in denen das Array transparent ist, und Wellenlängenbereiche, in denen kein Licht propagiert wird. Die Herausforderung besteht hier darin, den eigentlichen Resonator und die Bandstruktur des Umgebungsmediums so aufeinander abzustimmen, dass die Resonanz exakt im gewünschten Bereich auftritt. Bei der Berechnung der Effizienz von LEDs taucht das Problem der Resonanzberechnung in einer weiteren Form auf. Abb. 3 zeigt in einem Falschfarbenplot das Fernfeld einer Dipolquelle, die in einem periodischen Medium platziert wurde. Die periodischen Strukturen



◀ Abb. 1:
Zirkularer Gitterresonator

¹ M. Rozova, J. Pomplun, L. Zschiedrich, F. Schmidt, S. Burger. **3D finite element simulation of optical modes in VCSELs**. Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XX, B. Witzigmann, M. Osinski, F. Henneberger, Y. Arakawa (Eds.), Vol. 8255, pp. 82550K, Proc. SPIE, 2012. ² L. Zschiedrich, H. Greiner, S. Burger, F. Schmidt; **Numerical analysis of nanostructures for enhanced light extraction from OLEDs**. Submitted: Light-Emitting Diodes: Materials, Devices, and Applications for Solid State Lighting XVII. Vol 8641, Proc. SPIE, 2013



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Wir entwickeln einen adaptiven Finite-Elemente-Code hoher Ordnung mit flexiblen gemischten Gittern, der in der Lage ist, effizient und zuverlässig Resonanzen nano-optischer Bauelemente wie vertikal abstrahlende Oberflächenlaser (VCSEL), Leuchtdioden (LEDs) und funktionale Komponenten von Solarzellen zu berechnen. Die Resonanzen werden direkt im Frequenzbereich, ohne Umweg über den Zeitbereich, bestimmt. Besonderer Wert wird auf eine automatische Selektion der gesuchten Resonanzen und die Identifikation von unerwünschten „Geisterlösungen“ gelegt. Kürzlich durchgeführte Benchmarks bestätigen die hohe Effizienz des Codes im Vergleich zu Konkurrenzprodukten.

Abb. 2: ▶
Mikrolaser-Resonator mit
photonischer Kristall-
struktur¹

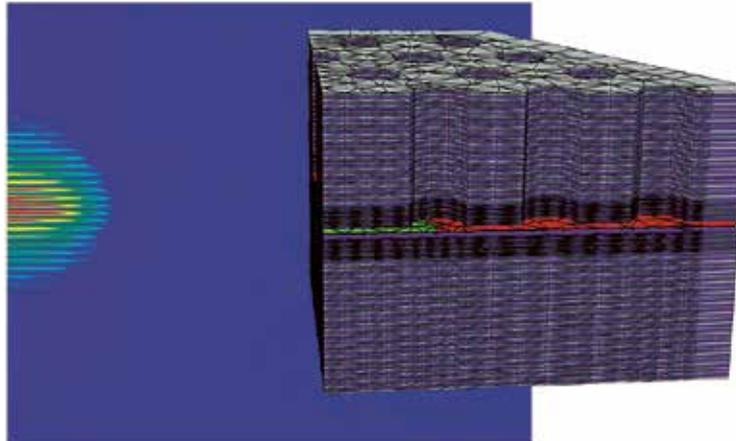
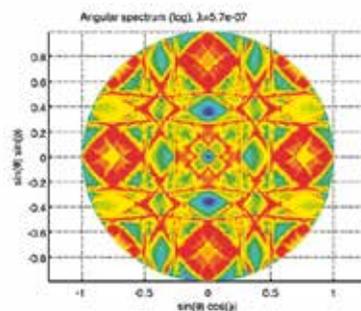


Abb. 3: ▶
Winkelspektrum des
Fernfelds einer Dipol-
quelle in einem perio-
dischen Medium



bilden lokale Resonatoren, die mit benachbarten Resonatoren wechselwirken. Dadurch kommt es zu dem gezeigten ungewöhnlichen und stark strukturierten Fernfeldbild.

Zur Berechnung dieser verschiedenen Resonanzen haben wir unseren adaptiven FEM-Code **JCMsuite** im Berichtszeitraum in wichtigen Punkten weiterentwickelt und neue Algorithmen untersucht und implementiert. Dabei gab es zwei Schwerpunkte. Zum einen haben wir gemischte Finite-Elemente-Gitter implementiert, die Gitter aus einer Kombina-

tion von Tetraedern, Würfeln, Prismen und Pyramiden aufbauen können, wobei innerhalb eines Elements hierarchische Formulierungen in der Ordnung verwendet wurden. Damit sind wir in der Lage, den Multiskalen-Eigenschaften vieler Komponenten, z. B. dem Auftreten von sehr dünnen Schichten im Nanometerbereich, besonders Rechnung zu tragen. Zum andern haben wir einen Algorithmus zur Identifikation von sogenannten „spurious modes“ entwickelt, der robust physikalische Moden von Diskretisierungsartefakten unterscheiden kann. Dieser Algorithmus war das Thema einer Dissertation³, die im Berichtszeitraum beendet und erfolgreich verteidigt wurde. Die Kernidee der Identifikation besteht in einer gleichzeitigen Betrachtung der Konvergenz über mehrere Gitterhierarchien und einer Sensitivitätsanalyse des Abstrahlungsverhaltens der Resonatoren. Damit gelingt es, automatisierte Frequenzscans durchzuführen und die Charakterisierung der Resonatoren deutlich schneller durchzuführen.

³B. Kettner: **Detection of spurious modes in resonance mode computations**. Free University Berlin, Department of Mathematics and Computer Science, 2012, PhD

MODELLGESTÜTZTE MEDIKATION IN DER REPRODUKTIONSMEDIZIN

Bearbeitet von: Claudia Stötzel, Susanna Röblitz, Peter Deuffhard
Kooperation: H.M. Jones, D.-O. Azulay, P.H. van der Graaf, S.W. Martin (Pfizer UK)
Förderung: Pfizer, EU FP7 Project PAEON
Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/jb/reproduktionsmedizin

Der Anteil der Paare mit unerfülltem Kinderwunsch aufgrund von Unfruchtbarkeit wird in Europa auf 12–15% geschätzt, und Experten vermuten, dass sich diese Zahlen innerhalb von zehn Jahren verdoppeln werden. Neben persönlichen Leidensgeschichten sind auch der Beitrag zum Rückgang der Geburtenraten und die damit verbundenen sozio-ökonomischen Auswirkungen nicht zu vernachlässigen. In 50% der Fälle spielen gesundheitliche Probleme der Frau eine Rolle, die häufig auf endokrinologischen Krankheiten beruhen, z. B. Endometriose oder dem Polyzystischen Ovarischen Syndrom (PCOS).

Ein gesunder Fortpflanzungszyklus beruht auf physiologischen Vorgängen wie Follikelreifung, Ovulation und Gelbkörperentwicklung. Diese werden durch ein exakt ausbalanciertes zeitliches Zusammenspiel zahlreicher Hormone gesteuert, u. a. luteinisierendes Hormon (LH), Follikel-stimulierendes Hormon (FSH), Estradiol (E2), Progesteron (P4) und Gonadotropin-freisetzendes Hormon (GnRH). Moderne reproduktionsmedizinische Verfahren wie die In-vitro-Fertilisation (IVF) oder die intrazytoplasmatische Spermieninjektion haben die Chance auf eine erfolgreiche Fortpflanzung deutlich erhöht. Trotzdem erreichen selbst die besten Praxen nur Erfolgsraten von etwa 35%. Dies liegt vor allem daran, dass die pathophysiologischen Zusammenhänge sowie der Einfluss äußerer Faktoren auf die Dynamik der Prozesse noch nicht vollständig geklärt sind.

Ein Computermodell des weiblichen Hormonzyklus kann dazu beitragen, ein vertieftes Verständnis dieser Vorgänge zu gewinnen und neue Therapieformen zu entwickeln, sowohl für die Verbesserung der natürlichen Fruchtbarkeit, als auch zur Erhöhung der Erfolgsraten bei der

künstlichen Befruchtung. Obwohl die relevanten Komponenten und Rückkopplungsmechanismen weitgehend bekannt sind und mit Hilfe von Experimenten qualitativ beschrieben wurden, stehen dynamische, d.h. zeitabhängige, mathematische Modelle erst am Anfang der Entwicklung. Solche Modelle gestatten medizinisch fundierte, quantitative Vorhersagen über die zeitlichen Änderungen des Systems.

In Zusammenarbeit mit der Pharmaindustrie (Pfizer) haben wir in unserer Gruppe das Modell GynCycle entwickelt¹, siehe Abb. 1, das die Regulation verschiedener Hormone sowie die Reifung von Follikeln und Gelbkörpern beschreibt. Das Modell generiert quasi-periodische Lösungen mit einer mittleren Zykluslänge von 28 Tagen. Zur Parametrisierung des Modells wurden Daten (Blutmesswerte von LH, FSH, E2, P4) von 12 gesunden Teilnehmerinnen einer Pfizer-Studie verwendet. Zusätzlich wurden Daten verwendet, welche die Veränderungen in den Hormonkonzentrationen nach der Gabe bestimmter Medikamente, sogenannter GnRH-Analoga, beschreiben.

Es gibt zwei Arten Analoga: Agonisten und Antagonisten. Agonisten agieren genau wie

Das Modell GynCycle

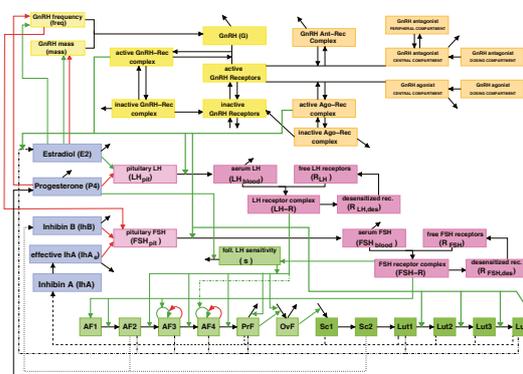


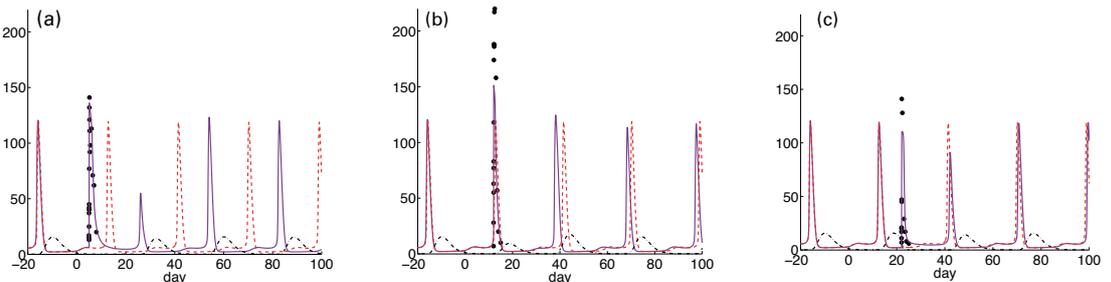
Abb. 1: Ablaufschema des Modells vom weiblichen Hormonzyklus

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**, Journal of Theoretical Biology 321:8–27, 2013



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Mathematische Modelle zur Beschreibung zeitabhängiger physiologischer Prozesse tragen zum Verständnis von Krankheiten bei und helfen bei der Entwicklung neuer Therapien. In der AG Mathematische Systembiologie wurde ein Modell des weiblichen Hormonzyklus entwickelt, mit dem die Gabe bestimmter Medikamente sowie deren Auswirkungen auf den Zyklus simuliert werden können. Im Rahmen des von der EU geförderten Projektes PAEON soll dieses Modell mit patienten-spezifischen Daten validiert und personalisiert werden und in der klinischen Praxis zum Einsatz kommen, um individuelle Behandlungsstrategien zu entwickeln.

Abb. 2: Ein regelmäßiger Zyklus (rot-gestrichelte Kurve: LH) durchläuft nach der Gabe eines GnRH-Agonisten eine temporäre Phasenverschiebung (blaue Kurve). Je nach Dosiszeitpunkt wird die Ovulation verzögert (a), vorgezogen (b), oder bleibt nahezu unverändert (c).



natürliches GnRH. Eine pulsatile Gabe stimuliert die Ausschüttung von LH und FSH, wogegen eine langfristige kontinuierliche Gabe, nach anfänglich stimulierendem Einfluss, hemmend wirkt. Agonisten werden bei der IVF eingesetzt, sowie zur Behandlung von Krebs und Endometriose. GnRH-Antagonisten, welche ebenfalls bei der IVF genutzt werden, blockieren dagegen die Wirkung des natürlichen GnRH, wodurch die Freisetzung von LH und FSH sowie die Produktion von E2 in den Eierstöcken sofort unterdrückt werden. Generell werden GnRH-Analoga eingesetzt, um den genauen Zeitpunkt der Ovulation zu steuern.

Timing bei der Medikamentengabe

Entscheidend bei der Wirkung der Analoga ist das richtige Timing bei der Verabreichung der Medikamente. Diese Situation wird mit dem GynCycle Modell anschaulich dargestellt, siehe Abb. 2. Je nach Zeitpunkt, Dosis und Dauer der Gabe liefert die Simulation unterschiedliche Ergebnisse bezüglich Unterdrückung bzw. Verschiebung der Ovulation, sowie zur Normalisierung des Zyklus nach Ende der Behandlung. Diese Ergebnisse stimmen mit Beobachtungen aus entsprechenden Studien überein. In der Praxis ist es jedoch schwierig, solche Vorhersagen zu treffen, da sich Empfehlungen für die Verabreichung der Medikamente in der Regel an Mittelwerten orientieren. Mit individuellen mathe-

matischen Modellen für einzelne Patienten ließe sich die Prognose deutlich verbessern.

Um solche individualisierten Modelle zu erstellen, ist es notwendig, Patientendaten über einen längeren Zeitraum (2–3 Zyklen) hinweg zu erheben. Das funktioniert am besten in der klinischen Praxis, wo sich Patienten über mehrere Wochen hinweg in ärztlicher Behandlung befinden. Gemeinsam mit Medizinern, Biologen und Informatikern aus verschiedenen europäischen Ländern wollen wir im Rahmen des von der EU geförderten Projektes PAEON² aus solchen Daten patientenspezifische Behandlungsstrategien für fertilitätsrelevante Krankheiten ableiten. Dafür stellt unsere Arbeitsgruppe geeignete Algorithmen zur Verfügung. Außerdem entwickeln wir neue Methoden zur Analyse von Unsicherheiten in Modell und Daten, aus denen sich Aussagen über die intra- und interindividuelle Variabilität des Systems gewinnen lassen.

Die Methoden, die in dem Projekt entwickelt werden, sind nicht nur auf die Reproduktionsmedizin anwendbar. Auch andere medizinische Bereiche oder Organismen, bei denen zeitabhängige physiologische Prozesse mit Hilfe mathematischer Modelle abgebildet werden können, profitieren zukünftig von unseren Erkenntnissen.

² Verbundprojekt Nr. 600773, Model Driven Computation of Treatments for Infertility Related Endocrinological Diseases

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. Scharnoi, M. Weber

Kooperation: FU/HU Chemie, Charité

Förderung: SFB-765, DFG

Inhalt: Die Kinetik eines Bindungsprozesses wird durch die multivalente Präsentation von Wirkstoffen verändert. Neue mathematische Modelle wurden hierzu hergeleitet. Insbesondere untersuchten wir den „rebinding effect“

TRANSFORMATIONSPRODUKTE IM TRINKWASSER

Bearbeitet von: V. Durmaz, M. Weber

Kooperation: T. Ternes (BfG), H. Mückter (LMU)

Förderung: Verbundprojekt TransRisk, BMBF

Inhalt: Chemikalien werden im Wasserkreislauf biotisch und abiotisch transformiert. Wir identifizieren und priorisieren das Risikopotential der Transformationsprodukte.

SELEKTIVES SCHMERZMITTEL

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

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

Förderung: VIPProgramm (über Charité), BMBF

Inhalt: Wir konnten durch Laborversuche bekräftigen, dass unser computer-designtes Schmerzmittel keine zentralen Nebenwirkungen auslöst. Aufgrund dieses Erfolges haben wir die MathPharm GmbH gegründet, die den Wirkstoff vermarkten soll.

EFFEKTIVE MOLEKÜLSIMULATION

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

Kooperation: FU Chemie, BfR, Uni Zürich, Coll. Mount St. Vincent (New York)

Förderung: MATHEON, Projekt A19

Inhalt: In Zukunft sollen detaillierte quantenchemische Informationen in die Molekülsimulationen einfließen können. Wir haben zudem das Potential von randomisierten Matrix-Algorithmen und von der Zeitextrapolation durch Markov-Operatoren erforscht.

ANALYTISCHE CHEMIE

Bearbeitet von: Computational Molecular Design

Kooperation: Bundesanstalt für Materialforschung (BAM)

Förderung: BAM

Inhalt: Wir haben erfolgreich zum Verständnis der Resultate chemisch-analytischer Experimente beigetragen. In der Graduiertenschule SALSA forschen wir an neuen analytischen Verfahren mit.

LEHREND LERNEN – LERNEND LEHREN

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

Kooperation: S. Tappert (HU Berlin/ St. Franziskussschule),

Inhalt: Es werden angehende Lehramtsstudenten mit Schülern in Kontakt gebracht und Schülern ein Einblick in den universitären Betrieb gegeben. In der Vorlesung werden den angehenden Lehrern praxisnahe Beispiele aus der Mathematik vorgestellt, die genutzt werden können, um den Unterricht für die Schüler ansprechender zu gestalten.

SKELETTALE BIOMECHANIK

Bearbeitet von: R. Ehrig

Kooperation: W.R. Taylor (ETH Zürich), M. Heller (U Southampton), G. Duda (JWI HU Berlin)

Inhalt: Die Verfahren zur Ermittlung skelettaler Parameter aus fluoroskopischen oder markerbasierten Messungen wurden zur Analyse der Anterior-posterior-Translation und der inneren Rotation im Kniegelenk bei passiver und aktiver Bewegung angewendet. Dadurch ließen sich durch Verletzungen oder Degeneration verursachte veränderte Charakteristiken der Kniekinematik im Detail analysieren.

REAKTIONSKINETIK IN BIOSENSOREN

Bearbeitet von: T. Dierkes, S. Röblitz, J. Plöntzke

Kooperation: Fraunhofer IBMT Potsdam-Golm

Förderung: Förster-Technik GmbH Engen
Inhalt: Es wurde ein chemisches Reaktionsmodell entwickelt, welches die Vorgänge in einem kompetitiven Immunoassay zur Progesteronbestimmung in Milch beschreibt. Dabei müssen Effekte wie Wiederbindung oder unspezifische Reaktionen berücksichtigt werden.

HORMONZYKLUS UND STOFFWECHSEL DER MILCHKUH

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

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

Inhalt: In Kooperation mit Tierwissenschaftlern werden anhand des am ZIB entwickelten Modells BovCycle Mechanismen untersucht, die die Fertilität von Milchkühen beeinflussen. Darüber hinaus entwickeln wir ein Modell zur Regulation des Kaliumhaushalts bei Kühen.

EFFIZIENTE ALGORITHMEN IN DER SYSTEMBIOLOGIE

Bearbeitet von: T. Dierkes, 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.

DISKRETE/KONTINUIERLICHE MODELLIERUNG IN DER SYSTEMBIOLOGIE

Bearbeitet von: C. Stötzel, S. Röblitz

Kooperation: A. Bockmayr, H. Siebert (FU)

Förderung: MATHEON Projekt A18

Inhalt: Um den Parameter- und Zustandsraum von Differentialgleichungsmodellen zu untersuchen, kann es hilfreich sein, ein entsprechendes diskretes Korrespondenzmodell zu analysieren. Wir untersuchen, wie solche Modelle unter Erhaltung bestimmter Strukturen, z. B. Periodizität, geeignet konstruiert werden können.

DEFEKTREREKONSTRUKTION 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 physikalisch motivierte Heuristiken zur Datenvorverarbeitung und zur schnellen Bestimmung der 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 numerische Optimierungsverfahren auf Basis der LDDMM-Methoden entwickelt. Eine unterschiedliche Diskretisierung des Geschwindigkeitsfeldes und der Formdarstellung erlaubt dabei eine sehr flexible adaptive Verfeinerung.

CHIRURGIEPLANUNG

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

Kooperation: R. Kornhuber (FU Berlin), A. Schiela (TU 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), K. Kunisch (U Graz)

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. Adaptive Quantisierungen wurden für nichtlineare Probleme der Defibrillation entwickelt.

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 Bypass-Operationen.

ELEKTRISCHE HERZERREGUNG

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

Kooperation: L. Pavarino (U Milano), M. Minion (Stanford)

Inhalt: Die Simulation der Herzerregung ist aufgrund stark unterschiedlicher Zeit- und Ortskalen 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-Dünnschichtsolarzelle mit 14% Zellwirkungsgrad. Unsere Aufgaben 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 AUSSENRÄUME

Bearbeitet von: T. Pollok, F. Schmidt

Kooperation: K. Schmidt (TU Berlin)

Förderung: Projekt D23, MATHEON

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 SILIZIUMDÜNNSCHICHT-SOLARZELLEN

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

METALLISCHE NANOSTRUKTUREN ZUR PLASMONISCHEN ABSORPTIONSVERSTÄRKUNG IN ULTRADÜNNEN CIGS-SOLARZELLEN

Bearbeitet von: P. Manley, F. Schmidt

Kooperation: Helmholtz-Zentrum Berlin

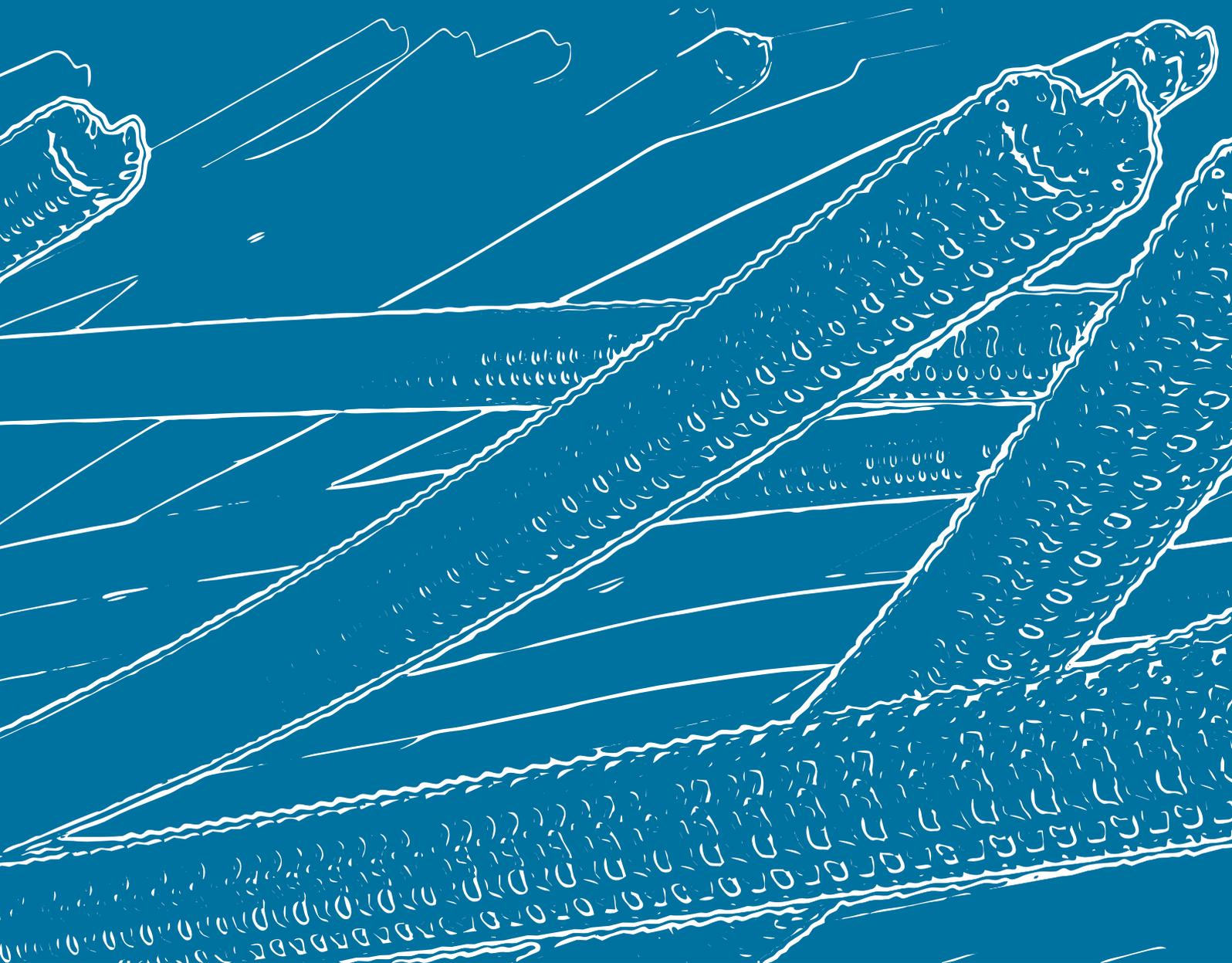
Inhalt: Ultradünne Solarzellen benötigen besondere optische Systeme für bestmögliche Absorptionsverstärkung. In diesem Projekt wird die Absorptionsverstärkung in ultradünnen CIGS-Solarzellen durch optimale Platzierung von plasmonischen Silberpartikeln untersucht.





VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

Unsichtbares sichtbar machen



VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

Leitung: Hans-Christian Hege

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

MISSION

Wir schaffen Werkzeuge zur visuell gestützten Datenanalyse. Die interaktive Analyse ergänzt die automatische, wenn unbekannte Fakten, Beziehungen oder Strukturen gesucht werden, Daten zu komplex für eine vollautomatische Analyse sind, wesentliche Datenmerkmale nur qualitativ definiert sind, oder wenn erst eine Übersicht über die Daten gewonnen werden muss, ehe konkrete Fragen formuliert und Hypothesen gebildet werden können. Weiterhin entwickeln wir voll- und halbautomatische Verfahren zur Verarbeitung und Analyse von raumzeitlichen Daten (Feldern, Bildern, Geometrien und Graphen).

Zum Einsatz kommen Methoden der Bild- und Geometrieverarbeitung, der Datenanalyse sowie der Computergrafik, Datenvisualisierung und Mensch-Computer-Interaktion. Ziel unserer methodischen Forschungen und der Software-Entwicklungen sind praxistaugliche Lösungen. Die Forschungsprojekte sind daher in konkrete Anwendungskontexte gebettet. Anwendungsgebiete sind die Natur-, Ingenieur- und Umweltwissenschaften sowie die Medizin.

STRUKTUR

Die Abteilung besteht aus vier Arbeitsgruppen:

- **Visualisierungsalgorithmen**
(Ltg. Hans-Christian Hege)
- **Visualisierungssysteme**
(Ltg. Dr. Steffen Prohaska)
- **Vergleichende Visualisierung**
– bis Aug. 2012 – (Ltg. Dr. Ingrid Hotz)
- **Medizinische Planung**
(Ltg. 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

Jens Kasten, Ingrid Hotz und Hans-Christian Hege erhielten den Best Short Paper Award der Eurographics Conference on Visualization (EuroVis 2012) für die Arbeit „Vortex Merge Graphs in Two-dimensional Unsteady Flow Fields“. Moritz Ehlke, Heiko Ramm, Hans Lamecker und Stefan Zachow erhielten den Best Poster Award des Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM 2012) für den Beitrag „Efficient projection and deformation of volumetric intensity models for accurate simulation of X-ray images“. Norbert Lindow, Daniel Baum, Ana-Nicoleta Bondar und Hans-Christian Hege erhielten einen Honorable Mention Award für die Arbeit „Dynamic Channels in Biomolecular Systems: Path Analysis and Visualization“ auf dem IEEE Symposium on Biological Data Visualization (BioVis 2012). Stefan Zachow und Hans Lamecker erhielten den MATHEON-Ausgründungspreis für den erfolgreichen Transfer von Forschungsergebnissen aus dem MATHEON in die Wirtschaft durch Gründung des Spin-Offs 1000Shapes GmbH.

VISUALISIERUNGSSYSTEME¹

Für die Visualisierung von Strukturen in unscharfen Daten, die durch nicht-parametrische Zufallsverteilungen charakterisiert sind, wurden Verfahren zur Quantifizierung von Unsicherheiten entwickelt. Die Analyse von instationären Strömungen wurde durch Techniken zur Extraktion von Wirbelstrukturen² und ein allgemeines Schema für charakteristische Kurven in Strömungen verbessert³. In der Molekülvisualisierung wurden neue Verfahren zur interaktiven

¹ www.zib.de/de/visual/algorithmen.html ² Koop.: B.R. Noack, Institute P', Poitiers, Frankreich, www.pprime.fr ³ Koop.: H. Theisel, Universität Magdeburg, AG Visual Computing www.cs.uni-magdeburg.de/visual und T. Weinkauff, Max-Planck-Institut Informatik, AG Feature-Based Data Analysis, <http://feature.mpi-inf.mpg.de> ⁴ Koop.: A.-N. Bondar, Freie Universität Berlin, Physik, AG Theoretische Molekulare Biophysik, www.physik.fu-berlin.de/einrichtungen/ag/ag-bondar ⁵ Koop.: M. Oberländer, Max-Planck-Institut für biologische Kybernetik, Tübingen, www.kyb.tuebingen.mpg.de/de/forschung/fg/oberlaendergroup.html und B. Sakmann, Max Planck Florida Institute, www.maxplanckflorida.org ⁶ Virtual gastrointestinal tract, www.vigorpp.eu ⁷ Koop.: L. Goubergrits, U. Kertzscher, K. Affeld; Charité Berlin, Labor für Biofluidmechanik, www.charite.de/biofluidmechanik/ ⁸ www.zib.de/de/visual/visualisierungssysteme.html

Exploration der Hohlraumdynamik in biomolekularen Systemen entwickelt⁴. Im Projekt „Cortex in Silico“ wurden die vorhandenen Verfahren zur Rekonstruktion von großen neuronalen Netzwerken erweitert und durch Werkzeuge zur Analyse von synaptischen Verbindungen ergänzt⁵. Im Rahmen des EU-Projekts Vigor++⁶ wurden Verfahren zur Unterstützung der Stadienbestimmung bei Morbus Crohn sowie eine allgemeine Technik zum interaktiven Auswählen von Strukturen in 3D-Volumendarstellungen entwickelt. Die Arbeiten zu zerebralen Aneurysmen ergaben ein differenzierteres Bild zum Risiko, dass diese aufreißen.⁷

VISUALISIERUNGSSYSTEME⁸

Visualisierungsverfahren werden in die Softwaresysteme **Amira** und **Avizo** integriert.⁹ Kooperationspartner des ZIB erhalten diese kostenfrei.¹⁰ Die Verfahren zur Analyse des Porenraums in CT-Aufnahmen von Bodenproben und in Asphalt und zur Analyse von Rissen in CT-Aufnahmen¹¹ wurden weiterentwickelt, ebenso wie automatische und semi-automatische Verfahren zur Rekonstruktion von kompletten Mikrotubuli-Spindeln aus mehreren Elektronentomogrammen¹² und Verfahren zur Integration von Daten aus 2D- und 3D-Bildgebungsverfahren zur Untersuchung des Heilungsprozesses in Knochengewebe.¹³ Im Rahmen des Berliner Skulpturennetzwerks wurde die im Vorjahr entwickelte iPad-Anwendung für die Vermittlung von Zusatzinformationen in der aktuellen Pergamon-Sonderausstellung eingesetzt und nach erfolgreicher Evaluierung im App-Store veröffentlicht.

VERGLEICHENDE VISUALISIERUNG¹⁴

Ziel der Arbeitsgruppe ist die Visualisierung von tensor- und vektorwertigen Daten. Zur Visualisierung zeitabhängiger Strömungen wurden Methoden zur Verfolgung von Wirbelstrukturen,

deren Entstehung sowie Verschmelzung entwickelt¹⁵. Neben dieser strukturellen Strömungsanalyse wurde eine automatische illustrative Visualisierung entwickelt, die Handskizzen von Anwendern simuliert. Hierfür wurden robuste und effiziente Algorithmen entwickelt, die auch eine Hierarchisierung der Wirbelstrukturen in Wirbelbäume erlauben und eine interaktive statistische Analyse ermöglichen. Zur Analyse von Belastungssensoren im Kontext von Bauteilentwurf und -gestaltung, wurde das Konzept von Merkmalsräumen weiter entwickelt und durch neue Visualisierungsmethoden ergänzt¹⁶, u. a. interaktive Texturerzeugungsmethoden, basierend auf einer anisotropen Verallgemeinerung von Delaunay- und Voronoistrukturen.

MEDIZINISCHE PLANUNG¹⁷

Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe liegt auf der Entwicklung von Verfahren zur geometrischen Rekonstruktion komplexer 3D-Strukturen aus digitalen Messdaten (Tomografien, Röntgenbildern, Fotografien), u. a. auf Basis von Formwissen, und deren Einsatz in vielfältigen Anwendungsgebieten (Medizin, Materialprüfung, Geowissenschaften). Zu diesem Zweck wurde an robusten Formanpassungs-, Segmentierungs- und Rekonstruktionsverfahren gearbeitet; weiterhin wurden statistische Formmodelle um Intensitätsinformation und Gelenkfreiheitsgrade erweitert.¹⁸ Neu entwickelte Verfahren zur automatischen Generierung von FE-Vernetzungen für komplexe geometrische Konstellationen wurden in die Software ZIB-**Amira** integriert. Ferner wurden Methoden zum Design von Implantaten und deren Anpassung an anatomische Strukturen entwickelt und für Anwendungen in der orthopädischen Chirurgie und der Gesichtschirurgie eingesetzt. In einer klinischen Kooperation wurde der Einfluss von Kiefersegmentverlagerungen auf die Atemwege untersucht¹⁹.

⁸ Koop.: Visualization Sciences Group, www.vsg3d.com ⁹ www.amira.zib.de ¹⁰ Koop.: BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, www.bam.de

¹¹ Koop. T. Hyman, Max-Planck-Institut für Molekulare Zellbiologie und Genetik, www.mpi-cbg.de ¹² Koop.: P. Fratzl, Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, www.mpikg.mpg.de ¹³ www.zib.de/index.php?id=85 ¹⁴ Koop.: B.R. Noack, Institute P', Poitiers, Frankreich, www.pprime.fr ¹⁵ Koop.: M. Stommel, Institut für Polymerwerkstoffe, Universität des Saarlandes, www.ipw.uni-saarland.de 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), Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) ¹⁸ Koop.: Universitätsklinik Köln, Klinik Prof. Sailer AG in Zürich, CH

3D-MODELLIERUNG UND VISUELLE ANALYSE VON NEURONALEN NETZEN

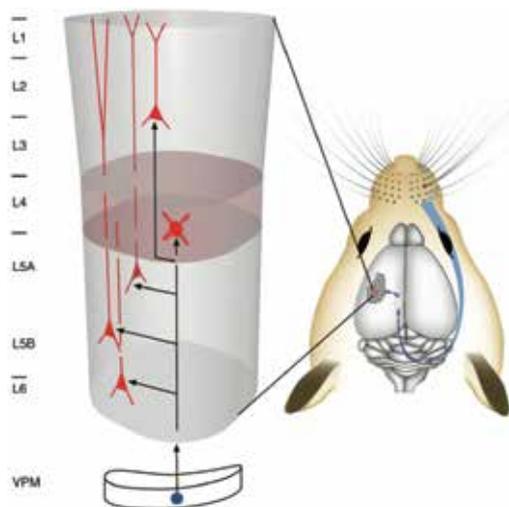
Bearbeitet von: Vincent J. Dercksen, Hans-Christian Hege

Kooperation: Marcel Oberlaender (Max-Planck-Institut für biologische Kybernetik), Bert Sakmann (Max Planck Florida Institute)

Förderung: Max-Planck-Institut für Neurobiologie

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2012/cortex-in-silico

Eine der großen Fragen der Neurobiologie ist, wie sensorische Information im Gehirn verarbeitet wird und wie sich daraus Verhalten ableitet. Ein häufig verwendetes Modellsystem zur Untersuchung dieser Frage ist das somatosensorische System der Ratte, bei dem eine Eins-zu-eins-Beziehung zwischen individuellen Barthaaren und eindeutig abgrenzbaren Bereichen in Thalamus und Cortex besteht. In jedem dieser Bereiche wird die sensorische Information je eines Barthaars verarbeitet. Im Cortex sind diese Bereiche zylinderförmig und werden deshalb „kortikale Säulen“ genannt (Abb. 1).



Durch realitätsgetreue 3D-Modellierung und numerische Simulation der neuronalen Schaltkreise dieses biologischen Systems hofft man, neue Erkenntnisse über Prozesse im Säugerhirn zu gewinnen, die traditionellen in-vivo/in-vitro Methoden verborgen bleiben. Unsere Aufgabe im Verbundprojekt „Cortical column in silico“ ist es, Werkzeuge zu entwickeln, mit denen, ausgehend von mikroskopischen Daten, anatomisch realistische neuronale Netze rekonstruiert und visuell gestützt analysiert wer-

den können. Die rekonstruierten 3D-Netzwerke ermöglichen ein besseres Verständnis der Anatomie des somatosensorischen Cortex und bilden den Ausgangspunkt für die Simulation der neuronalen Informationsverarbeitung.

ANATOMIEREKONSTRUKTION

Die anatomische Grundlage für das 3D-Netzwerkmodell bilden aus Bilddaten rekonstruierte Neurone, sowie Daten über deren Anzahl und räumliche Verteilung. Zur Gewinnung der Morphologien der Neurone wurde ein halb-automatischer Prozess entwickelt, mit dem im Hochdurchsatz sowohl dendritische als auch axonale Neuronmorphologien rekonstruiert werden können². Damit konnte relativ schnell eine repräsentative Auswahl von Neuronen rekonstruiert werden, die es erlaubte, biologische Aussagen, z. B. bezüglich Zellklassifikation (Abb. 3), stimulusabhängigen Verarbeitungspfaden oder Plastizitäten quantitativ zu belegen. Auch wurde eine Methode entwickelt, um in 3D-Bilddaten neuronale Zellkörper automatisch zu detektieren³. Mit dieser Methode konnte die Anzahl und Verteilung der verschiedenen Neuronentypen in einzelnen Säulen⁴ und im gesamten somatosensorischen Cortex (noch unveröffentlicht) bestimmt werden.

3D-MODELLIERUNG NEURONALER NETZE

Die neuronalen Netze werden modelliert, indem Einzelzellen entsprechend den für die verschiedenen Neuronentypen ermittelten Dichteverteilungen in ein Referenzmodell (definiert durch die Säulengeometrie) integriert werden⁵. Dazu werden die Neuronmorphologien repliziert und im Raum verteilt, so dass die Zellkörper der vorgegebenen Dichte- und Typverteilung entsprechen. Die Anzahl der synaptischen Verbindungen zwischen den Neuronen wird durch Betrachtung des strukturellen Überlapps

◀ Abb. 1:
Somatosensorisches System der Ratte: Tastinformation von einem Barthaar wird zu korrespondierenden Bereichen im Hirnstamm (1), Thalamus (VPM, 2) und anschließend zum Cortex (3) weitergeleitet. Die zylinderförmigen kortikalen Säulen enthalten Neuronenzellen verschiedenen Typs, die nach der Schicht (L1–L6) in der sie hauptsächlich auftreten benannt sind¹.

¹ Bild (modifiziert) aus: M. Helmstaedter, et al., **Reconstruction of an average cortical column in silico**. *Brain Res Rev* 55(2), pp. 193–203, 2007. ² Dercksen, V. et al., **Visualization in Medicine and Life Sciences II**, L. Linsen, H. Hagen, B. Hamann, H.-C. Hege (Eds.), pp. 27–44, Springer, Berlin, 2012. ³ Oberlaender, M. et al., **Automated three-dimensional detection and counting of neuron somata**. *J Neurosci Methods*, 180:1 (2009), pp. 147–160. ⁴ Meyer, H.S. et al., **Number and Laminar Distribution of Neurons in a Thalamocortical Projection Column of Rat Vibrissal Cortex**, *Cereb Cortex*, 20:10 (2010), pp. 2277–2286. ⁵ Egger, R. et al., **3D Reconstruction and Standardization of the Rat Vibrissal Cortex for Precise Registration of Single Neuron Morphology**. *PLoS Comput Biol* 8:12 (2012), e1002837.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Eine Grundfrage der Neurobiologie ist, wie sensorische Information vom Gehirn verarbeitet wird und sich daraus Verhalten ableitet. Zur Untersuchung dieser Frage wird ein Ausschnitt des somatosensorischen Cortex der Ratte, der von Barthaaren aufgenommene Tastinformation verarbeitet, als anatomisches Modell nachgebildet. Es wurden Methoden entwickelt, um die Nervenzellen aus Bilddaten zu rekonstruieren, in ein Modell zu integrieren, und ihre Struktur sowie synaptische Konnektivität visuell und quantitativ zu analysieren. Anhand des 3D-Modells kann die anatomische Grundlage der Signalverarbeitung besser verstanden und die neuronale Informationsverarbeitung simuliert werden.

abgeschätzt („Peter’s rule“). Dabei werden die lokal vorhandenen präsynaptischen Kontaktstellen (die Boutons auf den Axonen) auf die lokal vorhandenen postsynaptischen Stellen (Spines auf den Dendriten) verteilt. Auf diese Weise wurden 3D-Modelle erzeugt, die eine kortikale Säule, ja sogar den gesamten somatosensorischen Cortex repräsentieren⁶.

VISUELL GESTÜTZTE ANALYSE

Die geometrische Beschreibung der Neuronpopulation erlaubt es, die synaptische Konnektivität auf subzellulärer, zellulärer und Populationsebene zu berechnen. Durch zusätzliche Annotation des Modells mit Metadaten zu den Säulen, Zelltypen und subzellulären Strukturen können spezifische, biologisch relevante Fragestellungen untersucht werden, wie etwa: Von welchen Säulen und Zelltypen wird eine Zelle, oder eine Gruppe von Zellen aktiviert? Wie sind Synapsen auf postsynaptischen Zellen verteilt? Gibt es zelltypspezifische Häufungen? Um die Konnektivitätsdaten zugänglich zu machen und derartige Fragen zu beantworten, wurde ein Werkzeug entwickelt mit dem sich die synaptische Konnektivität – von der subzellulären Ebene bis zur Populationsebene – explorativ und quantitativ analysieren lässt.

Die Netzwerkmodelle, inklusive der synaptischen Verbindungen, bilden die anatomische Grundlage für die numerische Simulation der Signalverarbeitung in neuronalen Netzen. Dieses Thema soll künftig bearbeitet werden.

Abb. 2: ▶ Modellierung des somatosensorischen Cortex der Ratte. Jeder Modellierungsschritt wird in je einer Säule gezeigt: (a) Zellkörperverteilung, (b) Zelltypzuweisung, (c) Platzierung der dendritische Morphologien und (d) Platzierung der Axonmorphologien.

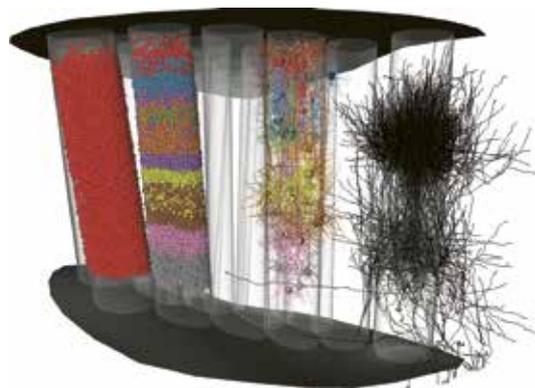
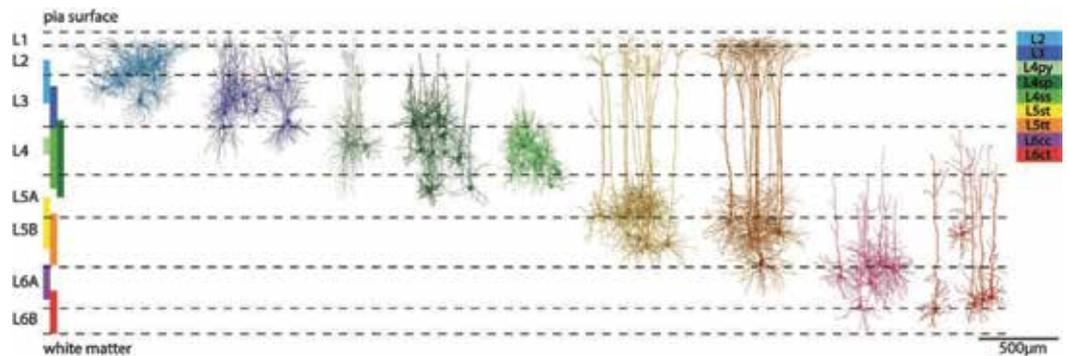


Abb. 3: ▶ Die entwickelte Pipeline erlaubt es, neuronale Morphologien zu rekonstruieren. So konnten die dendritischen Bäume von ca. 100 Neuronen rekonstruiert und nach geometrischen Eigenschaften und Position klassifiziert werden. Es resultierten neun verschiedene Zelltypen.⁷



⁶ Dercksen, V. et al., **Synaptic Connectivity in Anatomically Realistic Neural Networks: Modeling and Visual Analysis**. Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM), pp. 17–24, 2012. ⁷ Oberlaender, M. et al., **Cell Type-Specific Three-Dimensional Structure of Thalamocortical Circuits in a Column of Rat Vibrissa Cortex**, Cereb Cortex, 22:10 (2012), pp. 2375–2391.

ANATOMISCHE 3D-MODELLE AUS RÖNTGENBILDERN FÜR DIE INDIVIDUALISIERTE THERAPIEPLANUNG

Bearbeitet von: Moritz Ehlke, Heiko Ramm, Matthias Bindernagel, Hans Lamecker, Stefan Zachow

Kooperation: Charité Berlin, Zentrum für Muskuloskeletale Chirurgie; University of Southampton, School of Bioengineering; University of Calgary, Centre for Bioengineering, Research and Education; ETH Zürich, Institut für Biomechanik; 1000shapes GmbH

Förderung: EU FP7, Projekt MXL; DFG-Forschungszentrum MATHEON F2; medizintechnische Industrie

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2012/2d-3d-recon

Die modellgestützte Therapieplanung auf Basis von medizinischen Bilddaten spielt in der rekonstruktiven Chirurgie eine immer wichtigere Rolle. So lässt sich vor einer Operation nicht nur die Ist-Situation bewerten, sondern durch Planung und Simulation – z. B. eines Gelenkersatzes durch eine Prothese – auch das zu erwartende Ergebnis einschließlich der Funktion abschätzen.^{1,2} Solch eine modellgestützte Planung basiert u. a. auf drei-dimensionalen (3D) Modellen der individuellen Patienten-anatomie, die typischerweise aus tomographischen Bildgebungsverfahren (CT/MRT) gewonnen werden.

Obwohl die Zahl der CT-Untersuchungen in den letzten Jahren stetig ansteigt, kommt für Diagnostik und Therapieplanung in der orthopädischen Chirurgie immer noch deutlich häufiger konventionelle Röntgentechnik zum Einsatz.³ Gründe hierfür sind die breite Verfügbarkeit der Röntgengeräte, aber auch Abwägungen von Kosten und Strahlendosis zum erwarteten Nutzen – vor allem in Hinblick auf häufig durchzuführende Nachuntersuchungen. Außerdem lassen sich mit projektivem Röntgen Gelenke in Bewegung, unter Last des Körpergewichtes und auch während eines operativen Eingriffs abbilden.

Die Abschätzung einer 3D-Form aus 2D-Projektionsbildern ist ein aktuelles Forschungsthema.^{4,5,6,7} Das methodische Vorgehen ist dabei wie folgt: Instanzen eines geometrisch deformierbaren 3D-Modells der zu rekonstruierenden Struktur werden bei bekannten Aufnahmeparametern (Abstand der Röntgenquelle zum Detektor und dessen Größe, Patientenposition, etc.) in eine Bildebene projiziert. Diese Projektion erlaubt einen indirekten Vergleich des 3D-Modells mit einem gegebenen



◀ Abb. 1:
Klinisches Röntgenbild eines menschlichen Beckens (Hintergrund) überlagert mit einem 3D-Form- und Intensitätsmodell (Vordergrund rechts) und einer daraus erstellten Röntgensimulation (Vordergrund links).

Röntgenbild, wobei diejenige Instanz identifiziert wird, deren Projektion der anatomischen Struktur im Röntgenbild am ähnlichsten ist.

Werden als Modell hoch aufgelöste CT-Datensätze verwendet, dann lassen sich mittels Ray-Casting-Verfahren realitätsnahe Röntgenbilder erzeugen (Abb. 1). Die Berechnung plausibel deformierter Instanzen von hochaufgelösten strukturierten Gittern ist jedoch selbst auf modernen Mehrkern-Architekturen zeitaufwendig. Als effizient deformierbares 3D-Modell haben sich statistische Formmodelle (SFM) etabliert. Ziel ist es, die Darstellungsqualität des Ray-Casting mit den Deformationseigenschaften von SFM zu kombinieren. Zu diesem Zweck wurden SFM zu volumetrischen statistischen Form- und Intensitätsmodellen (SFIM) erweitert, auf deren Elementen eine Intensitäts- bzw. Dichteinformation kodiert werden kann. Solche SFIM bieten eine kompakte Repräsentation der in einer Population typischen Variationsbreite von Knochenform und Knochendichte.

Um Röntgenbilder aus SFIM zu generieren, wurden am ZIB effiziente Algorithmen entwickelt, die den physikalischen Prozess der Rönt-

Lambert-Beersches Gesetz:

$$I_{out} = I_{in} \cdot e^{-\sum_i \mu_i d_i}$$

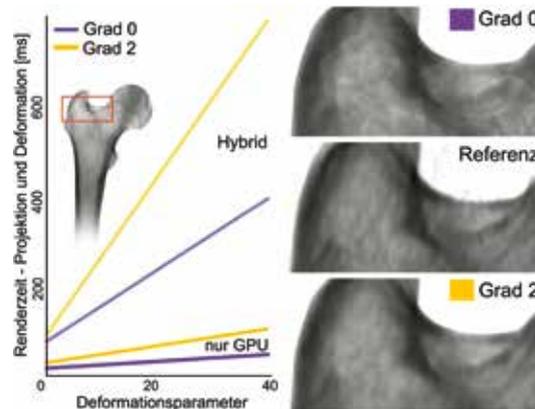
beschreibt die Abschwächung eines Röntgenstrahles mit der Intensität I_0 auf seinem Weg d durch Material i mit dem Absorptionskoeffizienten μ_i .

¹Ramm, H., Zachow, S.: **Individuelle Anpassung von Endoprothesen am virtuellen Patienten unter Berücksichtigung mechanischer Simulation**, Computer Aided Medical Engineering, 2012 (im Druck). ²Ramm, H., Zachow, S.: **Computergestützte Planung für die individuelle Implantatversorgung**, Health Academy, 2012 (im Druck) ³Umweltbundesamt: **Häufigkeit und Dosis röntgendiagnostischer Untersuchungen in Deutschland**. 06.02.2013 ⁴Lamecker, H. et al.: **Atlas-based 3D-Shape Reconstruction from X-Ray Images**, Proc. Int. Conf. Pattern Recognition, vol. 1, pp. 371-374, 2006 ⁵Dworzak, J. et al.: **3D Reconstruction of the Human Rib Cage from 2D Projection Images using a Statistical Shape Model**, Int. J. Comput. Assist. Radiol. Surg., vol. 5, no. 2, pp. 111-124, 2010 ⁶Zheng, G.: **Statistically deformable 2D/3D registration for estimating post-operative cup orientation from a single standard AP X-ray radiograph**, Annals of biomedical engineering, vol. 38, no. 9, pp. 2910–27, 2010 ⁷Baka, N. et al.: **2D-3D Shape Reconstruction of the Distal Femur from Stereo X-ray Imaging using Statistical Shape Models**, Medical Image Analysis, vol. 15, no. 6, pp. 840–50, 2011



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Diagnostik und Therapieplanung basieren in der orthopädischen Chirurgie häufig noch auf gewöhnlichen Röntgenbildern. Dazu benötigte Röntgengeräte sind weit verbreitet und Röntgenuntersuchungen verursachen im Vergleich zu CT eine geringere Strahlenbelastung. Aus der für Röntgenbilder typischen, projektionsbedingten Überlagerung resultieren jedoch Mehrdeutigkeiten, die eine verlässliche Interpretation der abgebildeten Strukturen erschweren. Am ZIB werden auf Basis von Modellwissen Verfahren entwickelt, um aus einem oder wenigen 2D-Röntgenbildern drei-dimensionale anatomische Strukturen zu rekonstruieren, die für eine modellgestützte Therapieplanung genutzt werden können.

Abb. 2: Die entwickelten GPU-basierten Verfahren erlauben eine effiziente Deformation und Projektion der SFIM bei gleichzeitig hoher Projektionsqualität. Ohne große Geschwindigkeitseinbußen lassen sich Bernsteinpolynome höheren Grades projizieren (Diagram). Dabei werden feinere Strukturen deutlich besser abgebildet (Nahansichten rechts).



genabsorption nach dem Lambert-Beerschen Gesetz auf modernen Grafikprozessoren hochparallel simulieren.⁸ Die Projektionsrate und die Darstellungsqualität hängen dabei von Anzahl und Größe der Volumenelemente, der Menge der gespeicherten Intensitätswerte pro Element und der Interpolation zwischen diesen ab (Abb. 2).

Um die Anzahl der Elemente so gering wie möglich zu halten und trotzdem eine bestmögliche Projektionsqualität zu erlangen, werden zur Interpolation der Intensität in den Elementen Bernsteinpolynome höherer Ordnung verwendet.⁹ Dadurch ist es trotz geringer Auflösung des Gitters möglich, eine hohe räumliche Auflösung der Dichtefunktion zu erreichen. Zudem wurde ein GPU-basiertes Deformationsverfahren implementiert, das auf teure Kopieroperationen zwischen Haupt- und Grafikspeicher verzichtet.^{10,11} Auf diese Art lässt sich eine Beschleunigung um den Faktor 5 bis 10 im Vergleich zu hybriden CPU- und GPU-basierten Methoden realisieren (Abb. 2). Das Verfahren wurde mit dem NVIDIA Best-Poster Award ausgezeichnet (Abb. 3).

Abb. 3: Für die Entwicklungen im Bereich der effizienten Simulation realistischer Röntgenbilder wurde die AG Medizinische Planung auf der Eurographics VCBM 2012 mit einem von der Firma NVIDIA gesponserten Preis ausgezeichnet.

Zur 3D-Rekonstruktion anatomischer Strukturen aus Röntgenbildern werden Ähnlichkeitsmaße untersucht, die es erlauben, SFIM-Projektionen mit klinischen Röntgenbildern zu vergleichen. Für die Steuerung der SFIM-Deformation sind effiziente, hierarchische Optimierungsmethoden gefordert, die ausgehend von einem reduzierten Bild- und Modellparameterraum sukzessiv den Rekonstruktionsprozess steuern. Die Berlin-Brandenburg School for Regenerative Therapies (BSRT) fördert die Entwicklung und den Ausbau dieser für die Qualität der Rekonstruktion kritischen Techniken mit einem Promotionsstipendium, um den Einsatz in klinischen Anwendungen zu ermöglichen.

Die entwickelten Verfahren werden in Zusammenarbeit mit klinischen Partnern unter anderem dazu genutzt, die Größe und Lage von Endoprothesen präoperativ zu planen¹² bzw. deren Funktion postoperativ unter Last und in Bewegung auszuwerten (z. B. die Erkennung kleinster Lageveränderungen des Implantates im Knochen).¹³ In Zukunft sollen die Techniken auch eine genaue relative Lagebestimmung von Gelenkstrukturen aus Fluoroskopie-Zeitreihen ermöglichen. Solche Untersuchungen sind wichtig, um etwa den Erfolg einer Operation zu bewerten und frühzeitig Probleme zu erkennen.



⁸Ehlke, M. et al.: **Fast and accurate DRRs for X-ray based Joint Surgery Planning**, 12th Meeting of Comp. Assist. Orthop. Surg., no. 293, 2012 ⁹Yao, J., Taylor, R.: **Tetrahedral Mesh Modeling of Density Data for Anatomical Atlases and Intensity-based Registration**, MICCAI, Springer, LNCS 1935, pp. 531-40, 2000 ¹⁰Ehlke, M.: **Simulating X-ray Images from Deformable Shape and Intensity Models on the GPU**, Masterarbeit, Technische Universität Berlin, 2012 ¹¹Ehlke, M. et al.: **Efficient projection and deformation of volumetric shape and intensity models for accurate simulation of X-ray images**, on Visual Computing for Biology and Medicine, (ZIB-Report 12-40), 2012 ¹²Galloway, F. et al.: **A Large Scale Finite Element Study of a of a Cementless Osseointegrated Tibial Tray**, Journal of Biomechanics, 2013 (submitted) ¹³Saevarsson, S.K. et al.: **Kinematic Differences Between Gender Specific and Traditional Knee Implants**, Journal of Arthroplasty, 2013 (accepted)

ANTIKE KONTEXTE BEGREIFBAR MACHEN – IPADS IM PERGAMONMUSEUM

Bearbeitet von: Marco Klindt, Daniel Baum, Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege

Förderung: BMBF – Bundesministerium für Bildung und Forschung

Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2012/ Pergamon



Das Verbundprojekt „Berliner Skulpturennetzwerk – Kontextualisierung und Übersetzung antiker Plastik“, eine Kooperation des Instituts für Klassische Archäologie der FU Berlin, der Staatlichen Museen zu Berlin, des Deutschen Archäologischen Instituts, der BTU Cottbus und des ZIB, widmete sich der historisch differenzierten Rekonstruktion antiker Ausstellungskontexte und der Erfassung und digitalen Publikation antiker Skulpturen.

Die Ergebnisse wurden im Rahmen einer großen Ausstellung im Pergamonmuseum zur antiken Metropole Pergamon in einer Kombination aus Skulpturen, Gipsabgüssen und einer künstlerischen Panoramainstallation von Yadegar Asisi präsentiert. Für die Präsentation der Exponate dieser Ausstellung konzipierte und entwickelte das ZIB eine multitouch-fähige Kioskanwendung für das iPad (Abb. 1).

Die Anwendung präsentiert Kontexte über verschiedene, sich ergänzende und interaktiv explorierbare Ansichten. Als zentrale Metapher wurde die Postkarte gewählt, um eine selbsterklärende Nutzung zu ermöglichen. Die Zuordnung der Inhalte erfolgt über eine Abbildung des Exponates auf der Vorderseite der „Postkarte“. Die Einordnung in den antiken architektonischen Zusammenhang und die Fundumstände werden auf mehreren Rückseiten in Kombination von Text und Bild (aktuelle und historische Fotos der Exponate und Fundsituationen, Skizzen, Tagebucheinträgen sowie hypothesenbasierte Darstellungen aus einem neuen Rekonstruktionsmodell) präsentiert (Abb. 2).

Der Zugriff auf die „Postkarten“ erfolgt über sechs verschiedene Ansichten, von denen drei den direkten Zugriff auf die Exponate ermöglichen und die restlichen eine Verortung über Kontexte bieten.

Der erste Zugang stellt die Karten als Fotostapel (Abb. 1) in einer spielerischen Umgebung dar, in der die Karten nach ihrem physischen Vorbild mit bis zu zehn Fingern gleichzeitig hin- und hergeschoben werden können. Diese Ansicht stellt die Anfangskonfiguration dar und bietet Besuchern einen intuitiven Einstieg. Die zweite Ansicht präsentiert alle Karten in einem übersichtlichen Gitter, das mit Fingergesten als Ganzes verschiebbar und in der Größe veränderbar ist. Die dritte Ansicht ordnet die Karten in Kategorien ein, entsprechend der Zugehörigkeit des Exponates zu architektonischen Baukomplexen.

◀ Abb. 1:
Einstiegsansicht: Stapel



◀ Abb. 2:
Rückseite der Karte zur
Zeus-Athena-Gruppe



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Wie kann man Museumsbesuchern die vergangenen räumlichen und zeitlichen Kontexte antiker Plastiken vermitteln? In diesem Projekt haben wir gemeinsam mit Archäologen eine iPad-Anwendung für eine Ausstellung entwickelt, mit der Besucher das antike Umfeld von Exponaten, deren Bedeutung, Fundumstände und Interpretationen durch die Wissenschaft spielerisch nachvollziehen können. Die Software wurde im Pergamonmuseum erfolgreich eingesetzt; sie ist für andere Ausstellungen anpassbar und kostenlos im App-Store erhältlich.

Die erste der Verortungsansichten präsentiert dem Besucher eine computergrafisch erstellte Übersicht des oberen pergamenischen Burgberges und erlaubt es auf einer zweiten Ebene, die Exponate in der Rekonstruktion wiederzufinden. Die zweite der Ansichten zeigt die Exponate an ihrem Standort in der Ausstellung (Grundriss des Pergamonmuseums) und ermöglicht den Zugriff über den heutigen Raum. Die letzte Ansicht zeigt ein um 360 Grad drehbares Bild des Panoramas von Y. Asisi, in dem die Ausstellungsstücke direkt lokalisiert sind (Abb. 3). Der Benutzer kann von seinem Standpunkt aus in eine Fotografie überblenden, die den Zustand des Burgberges im heutigen Bergama darstellt und die Grundlage zur Erstellung des Panoramabildes bildete. Dies ermöglicht es, auf intuitiv erfahrbare und ästhetisch ansprechende Weise die große Leistung der Archäologie hinsichtlich der Rekonstruktion antiker Kontexte nachzuvollziehen.

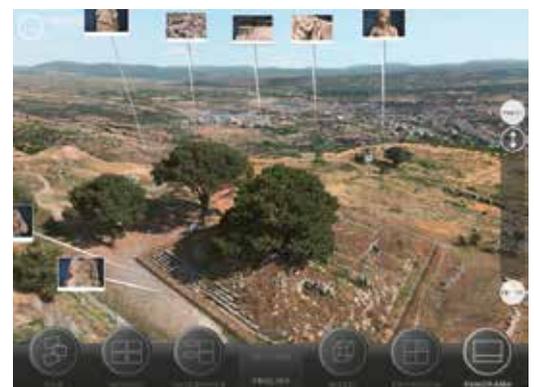
Der Mehrwert einer derartigen interaktiven Anwendung im musealen Ausstellungsraum wurde durch Aufzeichnen von Benutzerereignissen in der Anwendung selbst, durch Benutzerbeobachtungen und durch Befragungen von Benutzern quantitativ und qualitativ evaluiert¹. Die

Anwendung wurde von mindestens einem Achtel der Besucher benutzt, obwohl die Aufstellung der iPads in der Ausstellung eher ungünstig war. Die durchschnittliche Nutzungsdauer betrug etwa sieben Minuten; die Mehrzahl der Besucher benutzten die Anwendung in Gruppen von zwei oder mehr Personen. Die durchgeführten Benutzerbefragungen ergaben, dass 90% der Befragten die Anwendung als eine sinnvolle Erweiterung der Ausstellung betrachteten. Obwohl etwa 40% der Befragten keinerlei vorherige iPad oder Tablet-Erfahrung hatten, gaben 99% an, sie sei leicht oder sehr leicht zu benutzen.

Da die Besucher der Pergamonausstellung das Konzept der Bedienungsoberfläche und den Zugriff auf die Kontexte der Exponate sehr gut angenommen hatten, wurde die Plattform derart modifiziert, dass Inhalte und Navigationsansichten ohne Programmieraufwand für andere Ausstellungen angepasst werden können². Auch die grafische Gestaltung kann den Vorgaben des Kurators oder des Ausstellungsgestalters folgend sehr frei angepasst werden. Das Framework ist kostenlos im App-Store erhältlich³ und wird inzwischen von mehreren kulturell orientierten Institutionen auch international genutzt.

Abb. 3: ▶

Pergamon 129 n. Chr. und heute. Mit freundlicher Genehmigung von Y. Asisi



¹ M. Klindt, D. Baum, S. Prohaska, H.-C. Hege. **Conveying Archaeological Contexts to Museum Visitors: Case Study Pergamon Exhibition.** In Short Paper Proc. VAST 2012, Brighton UK, pp 25 – 28, 2012. ² M. Klindt, D. Baum, S. Prohaska, H.-C. Hege. **iCon.text – a customizable iPad app for kiosk applications in museum exhibitions.** In Proc. EVA Berlin 2012, pp 150–155, 2012. ³ www.zib.de/en/visual/software/iconcontext.html

PROJEKTE DER ABTEILUNG VISUALISIERUNG UND DATENANALYSE

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

AMMONITES

Bearbeitet von: M. Ehlke, S. Zachow

Kooperation: Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Uni Bochum; MPI Informatik, Saarbrücken

Förderung: DFG

Inhalt: Entrauschung von Mikrotomographie-Daten zur automatischen Segmentierung von fossilen Ammoniten

ANISOTROPIC SAMPLING

Bearbeitet von: A. Kratz, I. Hotz

Inhalt: Effiziente Erzeugung anisotroper Sampleverteilungen

ASPHALT

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

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

Inhalt: Entwicklung von Bildanalyseverfahren für die Analyse von Asphalt

AVR

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

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

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

CAS – GESICHTSCHIRURGIE

Bearbeitet von: L. Lubkoll, M. Weiser, S. Zachow

Kooperation: Universitätsklinikum Köln; Privatklinik Prof. Sailer in Zürich

Förderung: Klinik Prof. Sailer AG

Inhalt: Bimaxilläre, rotatorische Vorverlagerung von Kiefersegmenten zur kieferchirurgischen Behandlung von Schlafapnoen

CEREBRAL ANEURYSMS

Bearbeitet von: K. Pöthkow, C. Petz, 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 biologische Kybernetik Tübingen; 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

CVT

Bearbeitet von: J. Reininghaus, J. Kasten, I. Hotz

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

CRANIOSYNOS

Bearbeitet von: H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: Charité Berlin, Campus Virchow, Klinik für Neurochirurgie

Inhalt: Entwicklung von objektiven Kriterien und Methoden zur präoperativen Planung bei Kraniosynostose

DENTAL

Bearbeitet von: D. Kainmüller, H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: Universitätsklinik Köln, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie

Inhalt: Entwicklung automatischer Verfahren zur Segmentierung von Kieferknochen, Zähnen und Alveolarnerven aus CT-Bilddaten

DIGITAL MORPHOLOGY

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

Kooperation: Universitätskliniken Kiel und Freiburg; Institut für Biochemie und Biologie der Universität Potsdam; Dermatologikum Hamburg

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

ECHOBETONVIZ

Bearbeitet von: O. Paetsch, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

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

ENTIRE MOUSE BRAIN

Bearbeitet von: S. Prohaska

Kooperation: MPI Florida

Inhalt: Bildverarbeitung für großräumige Konfokalmikroskopie

FLOW VIS

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

Kooperation: Charité Berlin, Labor für Biofluiddynamik

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

HD(CP)2

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

Kooperation: DLR; Unis Leipzig, Köln, Mainz; DKRZ

Förderung: BMBF

Inhalt: Tracking von deterministischen und stochastischen Strukturen in Klimasimulationen

KNEE-KINEMATICS

Bearbeitet von: H. Ramm, R. Lieck, 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

MATHEON F2

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; 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

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: Uni Saarbrücken (Materialforschung); FU Berlin (Physik)

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); Unis 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 sowie zur biomechanischen Modellierung und Analyse für die Planung von Gelenkoperationen

NOSE – HNO-CHIRURGIE

Bearbeitet von: C. Petz, S. Zachow

Kooperation: Limmatklinik Zürich, Rhinologie und Rhinochirurgie; Klinikum Karlsruhe, HNO-Klinik; Charité Berlin, Labor für Biofluidodynamik

Inhalt: Rhinochirurgie unter Berücksichtigung der optimalen Nasenatmung

NUMREL VIS

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

Kooperation: MPI Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut), Potsdam

Förderung: MPI

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

PELVIZ

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

Kooperation: Aesculap AG, Tuttlingen; Muskuloskeletale Chirurgie, Charité

Förderung: Aesculap AG

Inhalt: 3-dimensionale Formanalyse des menschlichen Beckens aus CT-Daten

PERGAMON

Bearbeitet von: M. Klindt, 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

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

SHAPEDEV

Bearbeitet von: S.Zachow, H. Seim, O. Paetsch, S. Prohaska

Kooperation: BAM Berlin

Förderung: BAM Berlin

Inhalt: Zerstörungsfreie Vermessung von mechanischen Bauteilen in Computertomografieaufnahmen

TECHNOLOGIETRANSFER 1000SHAPES

Bearbeitet von: B. Bleuzé, H. Lamecker, S. Zachow

Kooperation: 1000shapes GmbH Berlin

Förderung: 1000shapes GmbH Berlin

Inhalt: Entwicklung von Algorithmen zur Unterstützung der Planung für die rekonstruktive Chirurgie

TECHNOLOGIETRANSFER AMIRA/AVIZO

Bearbeitet von: M. Leborgne, S. Schuberth, C. Petz, 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**

TENSOR HKS

Bearbeitet von: V. Zobel, I. Hotz

Inhalt: Wärmeleitungskern-Signatur zur Multiskalenvisualisierung von Tensorfeldern

TENSOR SEGMENTATION

Bearbeitet von: C. Auer, I. Hotz

Kooperation: IDAV, University of California Davis

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

TENSOR VIS

Bearbeitet von: A. Kratz, I. Hotz

Kooperation: Uni Saarbrücken; Uni Leipzig

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

UNCERTAINTY VIS

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

Kooperation: Biofluidodynamik-Labor Charité Berlin

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

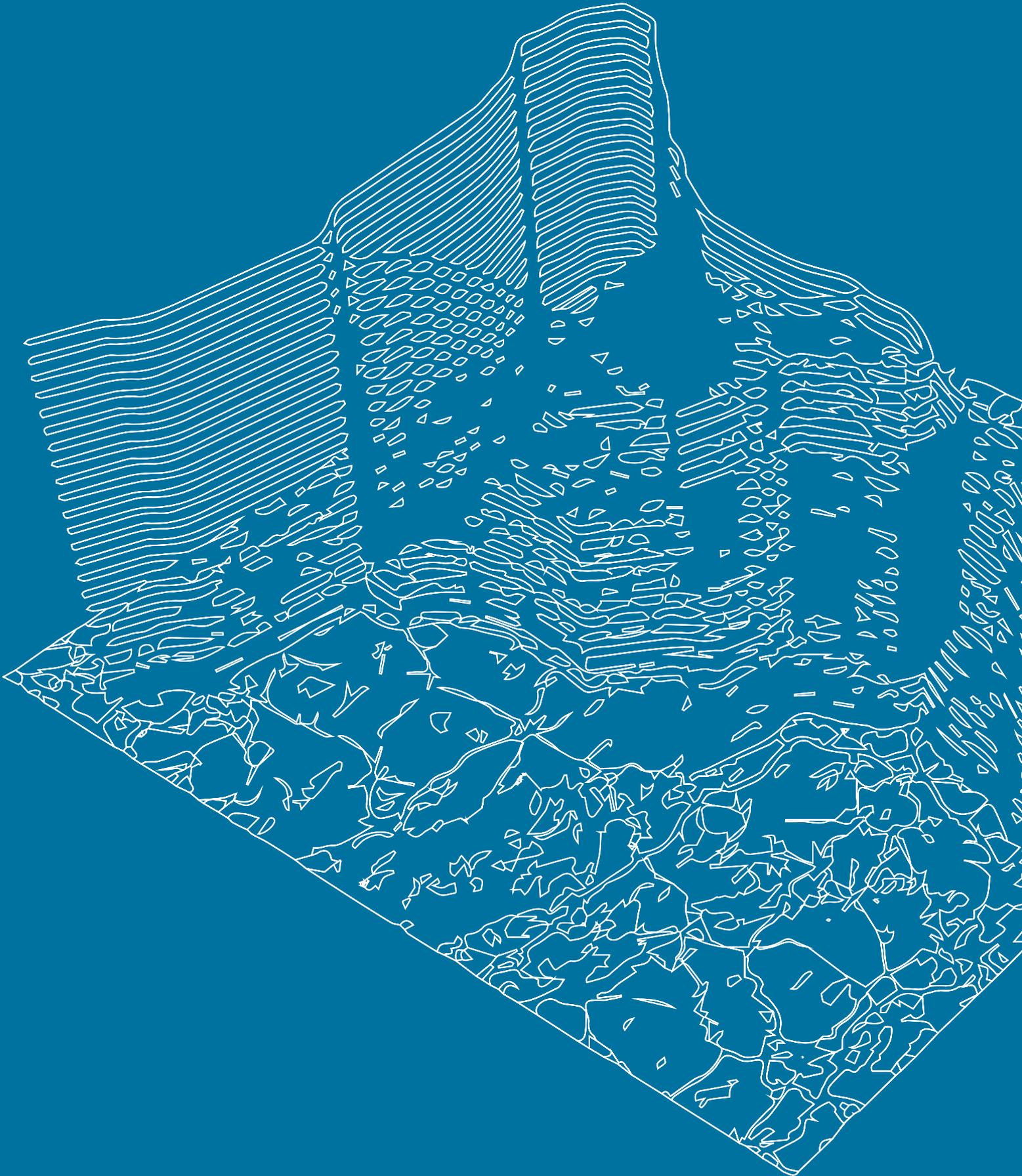
VIGOR++

Bearbeitet von: A. Wiebel, D. Kainmüller, H. Ramm, H.-C. Hege

Kooperation: Delft University of Technology; University College London Hospitals; ETH Zürich; Biotronics3D Ltd; Uni Amsterdam (Academisch Medisch Centrum); Vodera Ltd

Förderung: EU FP7

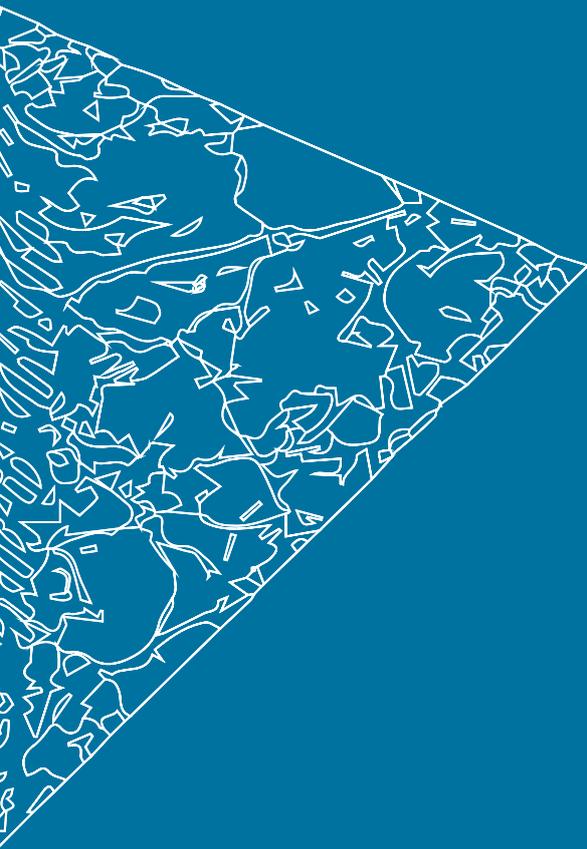
Inhalt: Visualisierung von Bilddaten, insbesondere aus der dynamischen kontrastmittelverstärkten Magnetresonanztomographie (DCE-MRI) des Abdomens, zur Diagnose und Beobachtung des Krankheitsverlaufs bei Morbus Crohn





OPTIMIERUNG

Simply the best!



OPTIMIERUNG

Leitung: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Martin Grötschel, Prof. Dr. Ralf Borndörfer

Weitere Informationen unter: <http://www.zib.de/optimierung.html>

MISSION

Je komplexer die in den Hochtechnologien zu beherrschenden technischen, ökonomischen, ökologischen, sozialen oder medizinischen Prozesse werden, desto mehr gewinnen Modellierung, Simulation und Optimierung an Bedeutung. „MSO“ hat sich längst zu einer eigenen Schlüsseltechnologie entwickelt, die mit großer Dynamik immer weitere Anwendungsgebiete erobert und durch die Schönheit und Eleganz ihrer mathematischen Theorie begeistert.

STRUKTUR

Mit der neu gebildeten AG Energie besteht die Abteilung aus nunmehr vier Arbeitsgruppen:

- **Verkehr und Logistik** (Ltg. Prof. Dr. Ralf Borndörfer)
- **Lineare und nichtlineare ganzzahlige Optimierung** (Ltg. Dr. habil. Thorsten Koch)
- **Energie** (Ltg. Dr. Benjamin Hiller)
- **Telekommunikation** (Ltg. Dr. Axel Werner).

SPIN-OFFS

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

PREISE UND AUSZEICHNUNGEN

- **Ralf Borndörfer**: Berufung auf eine W2-S-Professur an der FU Berlin
- **Fabio D'Andreagiovanni**: Doctoral Dissertation Award 2012 der Sapienza Università Editrice; Excellent Presentation Award of the ESF-JSPS Frontier Science Conference for Young Researchers
- **Frank Fischer** (TU Chemnitz), **Boris Grimm**, **Torsten Klug**: Third Prize in der RAS Problem Solving Competition 2012⁵

- **Armin Fügenschuh**: Ruf auf eine W2-Professur an der Universität der Bundeswehr Hamburg (angenommen)
- **Marika Karbstein**: Ultimative MATHEON-Adventskalenderaufgabe 2012⁶ (Abb. 1)
- **Andreas Löbel, Christof Schulz**: Step 4 in der SPEC⁷ CPUv6⁸ für **505.mcf**
- **SCIP-Team**: Nicht-lineare Kategorien der Pseudo-Boolean Competition 2012⁹
- **Thomas Schlechte**: GOR-Dissertationspreis 2012¹⁰; VBKI-Dissertationspreis 2012

VERKEHR UND LOGISTIK¹¹

Die Eisenbahnoptimierung ist mit dem BMBF-Projekt „Optimale Zugführung im Schienengüterverkehr“, dem MATHEON-Projekt B22 zur Zugumlaufplanung, einem Folgeprojekt zur Anpassungsoptimierung von ICE-Umläufen für DB Fernverkehr, einem Projekt zur mehrtägigen zyklischen Umlaufoptimierung mit LBW, einem neuen Pilotprojekt zur Zugdisposition mit Siemens und dem 2013 startenden „Bahn-Lab“ im neuen Forschungscampus MODAL das größte Anwendungsgebiet. In den Projekten „Optimierung der LKW-Autobahnmautkontrolle“ (S. 58) für das Bundesamt für Güterverkehr und „Wochenschemaoptimierung“ für LBW wurde der Durchbruch in die Praxis geschafft, im MATHEON-Projekt B15 zur „Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr“ wurde eine neue Theorie des Pfadzusammenhangs entwickelt. Mit zwei neuen Projekten über „Multikriterielle Optimierung“ (gemeinsam mit Prof. Skutella, TU Berlin) und „System Dynamics“ im neuen „SFB 1026 Nachhaltige Produktionstechnik“ (Sprecher Prof. Seliger, TU Berlin) hat die AG einen neuen Schwerpunkt gewonnen.

¹ <http://www.atesio.de> ² <http://www.intranetz.de> ³ <http://www.lbw-berlin.de> ⁴ <http://www.scip.zib.de> ⁵ <http://www.informs.org/Community/RAS/Problem-Solving-Competition/2012-RAS-Problem-Solving-Competition>



Abb. 1: ▲
Marika Karbstein gewinnt zum zweiten Mal in Folge den Preis für die Ultimative Mathekalender-Aufgabe.

LINEARE UND NICHTLINEARE GANZZAHLIGE OPTIMIERUNG¹²

Im Jahr 2012 lag der Mittelpunkt der Forschung in der Arbeitsgruppe auf der Entwicklung und Implementierung von neuen Algorithmen zur Lösung von gemischt-ganzzahligen nicht-linearen nicht-konvexen Problemen (MINLP). Mit dem Release 3.0 ist die **SCIP Optimization Suite** nun in der Lage, allgemeine MINLP-Probleme global optimal zu lösen. Benchmarks zeigen, dass es uns gelungen ist, auch hier wieder die Grenze des Machbaren zu erweitern. Dabei konnte gleichzeitig die Leistung im linear-ganzzahligen Teil weiter verbessert werden. Hierzu wurden auch umfangreiche Untersuchungen zur automatischen Dekomposition von Problemen durchgeführt, was gerade im Bereich großer Supply Chain Management-Probleme sehr erfolgreich zur Beschleunigung beigetragen hat (S. 62). Ebenso wurden Verfahren zur Parallelisierung weiter intensiv untersucht.

ENERGIE¹³

Das zentrale Projekt der AG Energie ist die „Forschungskoooperation Netzoptimierung“ (ForNe), in der unter Federführung des ZIB sieben Forschergruppen mit Open Grid Europe (OGE), dem Betreiber des größten deutschen Gastransportnetzes, Methoden zur Planung und Optimierung von Gastransportnetzen entwickeln. Die AG Energie beschäftigt sich hauptsächlich mit Fragen der Ausbauplanung, also der Bestimmung kostengünstiger Maßnahmen, die eine flexiblere Nutzung der bestehenden Transportkapazitäten bzw. deren Erhöhung ermöglichen. Hierfür werden vor allem Techniken der gemischt-ganzzahligen nicht-linearen Optimierung sowie Struktureinsichten in die zugrundeliegenden nichtlinearen Modelle der Gasphysik genutzt. Die Entwicklung und

Implementierung erfolgt in Zusammenarbeit mit der AG Lineare und Nichtlineare Ganzzahlige Optimierung. Daneben arbeiten wir an Methoden für eine effektive Überprüfung der technischen Realisierbarkeit gebuchter Transportkapazitäten. Im Jahr 2012 wurde das BMWi-geförderte Projekt „Untersuchung der technischen Kapazität von Gasnetzen“ erfolgreich abgeschlossen. Ein Buch mit den Projektergebnissen wird gerade fertiggestellt.

TELEKOMMUNIKATION¹⁴

Zukunftsweisende Netzwerktechnologie, Next Generation Networks und Energieeffizienz von Telekommunikationsnetzen stellen die zentralen Themen dar, an denen in der AG gearbeitet wird. Im BMWi-Projekt DESI wird zusammen mit den Projektpartnern ein Demonstrator aufgebaut, der energieeffizienten Netzbetrieb verdeutlichen soll. Durch die Verwendung von modernen Technologien wie adaptiven Bitraten und flexiblen Bandbreiten werden neue Möglichkeiten für den sicheren und stromsparenden Betrieb von Netzen geschaffen, die im Ende 2012 gestarteten BMBF-Projekt SASER ausgelotet werden. Bereits Anfang 2012 startete das DFG-Projekt Multi-FTTx, in dem (zusammen mit Prof. Ljubic, Universität Wien, im Rahmen des D-A-CH-Abkommens) multikriterielle Methoden zur Planung von optischen Zugangsnetzen untersucht werden. Im Projekt ROBUKOM (S. 60) wurden neue theoretische Konzepte zur robusten Optimierung entwickelt.

⁶ <http://www.mathekalender.de/index.php?page=problemPollEval> ⁷ Standard Performance Evaluation Corporation, eine Organisation von Hardwareherstellern zum Benchmarking von CPUs ⁸ <http://www.spec.org/cpuv6> ⁹ <http://www.cril.univ-artois.fr/PB12/> ¹⁰ <https://gor.uni-paderborn.de/index.php?id=302> ¹¹ <http://www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte.html> ¹² <http://www.zib.de/de/optimierung/telekommunikation/projekte.html> ¹³ <http://www.zib.de/de/optimierung/energy> ¹⁴ <http://www.zib.de/de/optimierung/telekommunikation.html>

AUTOBAHNMAUTKONTROLLE

MAUTPRELLEN IST DOCH NUR EIN SPIEL...

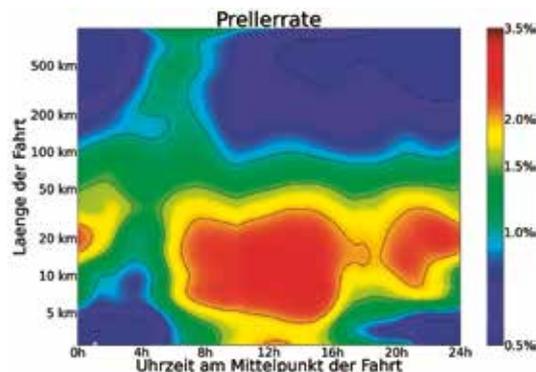
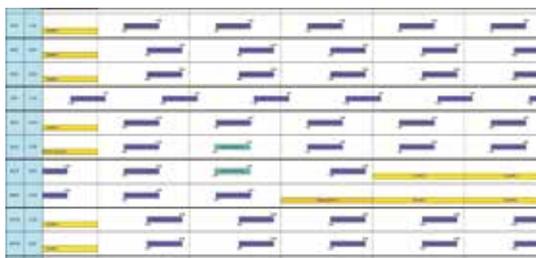
Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Guillaume Sagnol, Elmar Swarat

Kooperation/Förderung: Förderung durch das Bundesamt für Güterverkehr, Kooperation mit der IVU Traffic Technologies AG

Weitere Informationen unter: <http://www.zib.de/optimization/projects/details/article/tollcontrolopt.html>

Im Jahr 2005 wurde auf deutschen Autobahnen eine Maut für LKW ab einem zulässigen Gesamtgewicht von 12t eingeführt. Das Mautsystem ist elektronisch und basiert zum großen Teil auf On-Board-Units in den LKWs, die automatisch die Mautabrechnung vornehmen. Das Bundesamt für Güterverkehr (BAG) hat die Aufgabe, die Bezahlung der Maut zu kontrollieren. Dies geschieht zum einen durch von der Firma Toll-Collect betriebene stationäre Mautbrücken und zum anderen durch mobile Kontrollen des BAG. Bei diesen fahren Teams von zwei Kontrolleuren durch das Autobahnnetz und kontrollieren beim Überholen von LKWs, ob diese die Maut ordnungsgemäß entrichtet haben. Bei Verdacht auf Nichtzahlung können sie die LKW anhalten und kontrollieren.

Das ZIB hat mit dem BAG ein Projekt für eine effizientere Planung der mobilen Kontrollen durch den Einsatz von mathematischen Optimierungsalgorithmen gestartet. Die Touren sollen auf der Basis eines Optimierungsmodells automatisch bestimmt werden, und zwar zusammen mit konkreten Einsatzplänen für die Kontrolleure, siehe Abb. 4. Zielgrößen der Optimierung sind einerseits eine netzweite Kontrolle als auch eine Maximierung der Anzahl an kontrollierten Fahrzeugen. Als besonders komplex gestaltet sich die Einhaltung der Regeln zu Diensten und deren Reihenfolgen. Um diese Aufgaben zu lösen, haben wir den Algorithmus **TC-OPT** entwickelt.



DATENANALYSE

Zu diesem Projekt gehört eine sorgfältige Analyse von Daten über gebuchte Mautfahrten und Beanstandungen. Wir haben ein Wahrscheinlichkeitsmodell erstellt, das eine Schätzung der Prellerrate abhängig von bestimmten Fahrtenmerkmalen, wie z. B. Länge, Abfahrtszeit oder Emissionsklasse der Fahrt, ermöglicht. Ein Beispiel der Ergebnisse des Mautprellermodells ist in Abb. 1 angezeigt. Dieses Modell wird in einem von uns erstellten Simulationsprogramm verwendet (Abb. 3), um die Güte unserer Lösungsansätze zu testen. Es dient auch dazu, Parameter zu berechnen, welche für einen spieltheoretischen Ansatz gebraucht werden.

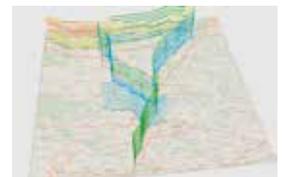
METHODEN DER OPTIMIERUNG

Das Mautsystem kann als eine Konfliktsituation betrachtet werden, in der manche LKW-Fahrer versuchen, möglichst wenig Kosten zu haben, während die Kontrolleure das Mauteinkommen maximieren möchten. **Spieltheorie** ist eine Disziplin der Mathematik, die verwendet werden kann, um Konfliktsituationen dieser Art zu studieren. Im Fall der LKW-Maut kann die beste Strategie der Kontrolleure durch das Konzept der **Stackelberg Equilibria** beschrieben

◀ Abb. 1:
Geschätzte Prellerrate abhängig von der Länge der Fahrt und der Uhrzeit, an der die Fahrt zur Hälfte zurückgelegt ist.



▲ Abb. 2:
Mobile Kontrollteams ermitteln per Infrarot-Technik, ob passierte LKW im automatischen System eingebucht sind.



▲ Abb. 3:
Screenshot des Mautkontrollsimulators

◀ Abb. 4:
Ausschnitt eines von **TC-OPT** berechneten Einsatzplanes



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Ziel des Projektes „Optimierung der Autobahnmautkontrolle“ besteht in der Entwicklung eines Algorithmus zur automatisierten, mathematisch optimalen Berechnung von Dienst- und Einsatzplänen für die mobilen Touren des Bundesamtes für Güterverkehr zur Kontrolle der LKW-Maut auf deutschen Autobahnen. Es müssen viele komplexe Regeln für die Touren, die Dienste und die Reihenfolge der Dienste berücksichtigt werden. Ein sehr wichtiger Aspekt ist die spieltheoretische Analyse der LKW-Fahrer und der Mautpreller, so dass daraus entwickelte Kennzahlen als Zielgröße für das Optimierungsmodell verwendet werden können.

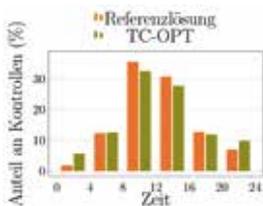


Abb. 5: Zeitliche Verteilung der Kontrollen für eine Referenzlösung des BAG und unseres Algorithmus (TC-OPT).

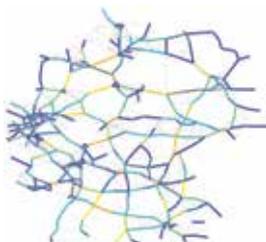


Abb. 6: Optimale Kontrollhäufigkeit auf dem Autobahnnetz. Warme Farben bedeuten mehr Kontrolle.

werden, d. h. eine Situation, in der die Maut-einnahmen maximal sind, unter der Annahme, dass die LKW-Fahrer die Maut prellen, wenn es für sie günstiger ist.

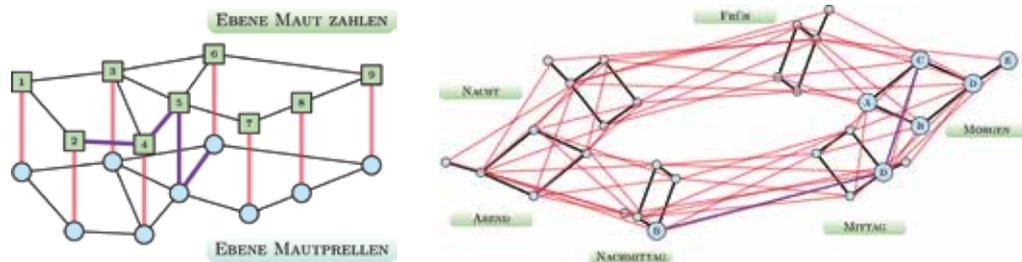
In unserem spieltheoretischen Modell werden die Strategien der LKW-Fahrer als Flüsse in einem Graphen mit zwei Ebenen dargestellt. Die obere Ebene enthält Autobahnstrecken sowie weitere Strecken, die befahren werden können, um der Maut auszuweichen. Die untere Ebene stellt das Mautprellen auf dem Autobahnnetz dar, wo Nichtzahler kontrolliert werden können und ggf. eine Strafe bekommen. Zum Beispiel bildet der blau hervorgehobene Fluss in Abb. 7 (links) eine Fahrt von 2 nach 6 ab, wobei die Maut auf 2 → 4 → 5 bezahlt und auf 5 → 6 geprellt wird. Die Strategie der Kontrolleure wird auch durch Flüsse repräsentiert, jedoch in einem sog. zyklischen Dienstgraphen. Die Knoten dieses Graphen stellen Kontrollstrecken dar, d. h. eine Menge von Autobahnstrecken, die innerhalb eines vorgegebenen Zeitraumes kontrolliert werden müssen. Ein Fluss in dem Dienstgraphen entspricht also einer Reihenfolge von Kontrollaufgaben, d. h. dem Einsatz eines Kontrollteams für einen Tag. Die Abb. 7 (rechts) zeigt ein Beispiel eines Dienstgraphen. Hier bilden die schwarzen Kanten ein Netz von Kontrollstrecken zu verschiedenen Zeiträumen, und die roten Kanten verbinden benachbarte Kontrollstre-

cken über zwei Zeiträume. Der blau dargestellte Fluss stellt also den Dienst eines Kontrollteams dar, das während der Zeitintervalle „Morgen“, „Mittag“ und „Nachmittag“ jeweils auf den Kontrollstrecken C, D und B patroullieren muss.

Ein Equilibrium kann in diesem Spiel mithilfe der **Linearen Programmierung** berechnet werden². Als Ergebnis bekommt man einen randomisierten Dienstplan, der beschreibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit welcher Dienst geplant werden sollte. Der tatsächliche Dienstplan wird dann mit einem **gemischt-ganzzahligen Programm** über einen Zeithorizont von einem Monat ermittelt. Dies sorgt dafür, dass verschiedene gesetzliche und tarifliche Regeln beachtet werden, wie ausreichende Ruhezeiten, Wochenarbeitszeiten oder zulässige Einsatzgebiete. In den Abb. 5 und 6 sind die berechneten zeitlichen und geographischen Kontrollverteilungen angezeigt. Mit dem spieltheoretischen Modell kann die Planung der Kontrollen stark verbessert werden, da erstmals das Verhalten der LKW-Fahrer berücksichtigt wird.

Bei der spieltheoretischen Strategie müssen 60,4% mehr Fahrer damit rechnen, regelmäßig kontrolliert zu werden als bei einer Strategie, die nur das Verkehrsaufkommen berücksichtigt³. Der Algorithmus **TC-OPT** befindet sich beim BAG im Testbetrieb.

Abb. 7: Beispiel eines Zwei-Ebenen-Graphen (links) und eines zyklischen Dienstgraphen (rechts), die jeweils für die Darstellung der Strategie der Fahrer und der Kontrolleure verwendet werden.



¹R. Borndörfer, G. Sagnol, and E. Swarat. **A Case Study on Optimizing Toll Enforcements on Motorways**. In 3rd Student Conference on Operational Research, volume 22 of OpenAccess Series in Informatics (OASICs), pages 1–10, 2012 ²R. Borndörfer, B. Omont, G. Sagnol, and E. Swarat. **A Stackelberg game to optimize the distribution of controls in transportation networks**. In Proceedings of the 3rd International Conference on Game Theory for Networks (GAMENETS 2012), volume 105 of Lecture Notes of the ICST, pages 224–235, 2012 ³R. Borndörfer, G. Sagnol, and E. Swarat. **Optimizing Toll Enforcement in Transportation Networks: a Game-Theoretic Approach**. To appear in Electronic Notes in Discrete Mathematics, Proceedings of the International Network Optimization Conference, INOC 2013

ROBUSTE TELEKOMMUNIKATIONSNETZE

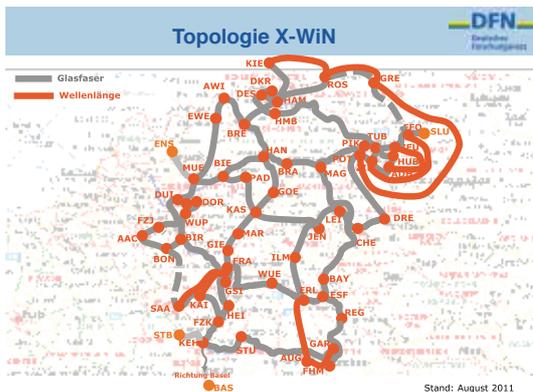
ENTWICKLUNG NEUER ROBUSTER OPTIMIERUNGSMODELLE UND ALGORITHMEN FÜR DAS NETZWERKDESIGN¹

Bearbeitet von: Fabio D'Andreagiovanni, Martin Grötschel

Kooperation/Förderung: Gefördert vom BMBF; Kooperation mit RWTH Aachen, TU Berlin, TU Chemnitz, DFN-Verein e. V., Nokia Siemens Networks

Weitere Informationen unter: <http://www.robukom.de>

In den letzten Jahren haben Telekommunikationsnetzwerke an Größe und Komplexität zugenommen. Durch die Anwendung mathematischer Optimierungsmethoden können dabei das Design von Netzen deutlich verbessert und Anforderungen berücksichtigt werden, bei denen die traditionellen Ansätze der Netzwerkengineure an ihre Grenzen stoßen. Eine besondere Herausforderung besteht dabei in Unsicherheiten bei der Netzwerkplanung: Häufig haben selbst geringfügig veränderte Eingabedaten für ein Problem eine deutlich suboptimale Lösung zur Folge, oder zulässige Lösungen erweisen sich als unzulässig. Das Projekt ROBUKOM¹, eine Kooperation aus fünf Forschungsgruppen zusammen mit dem Deutschen Forschungsnetz und Nokia Siemens Networks, widmet sich dieser Herausforderung: Optimierungsmodelle und Algorithmen für ein Netzdesign zu entwickeln, das robust gegenüber Abweichungen von den erwarteten Werten in kritischen Daten ist.

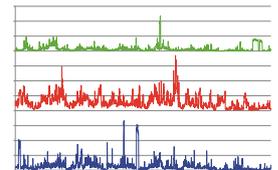


Während Netzwerkdesign mit vollständigen und exakten Daten bereits vielfältig untersucht wurde, ist die Forschung bei der Berücksichtigung von Unsicherheiten noch relativ jung. Wir konzentrieren uns daher darauf, wichtige theoretische Lücken zu füllen, ohne dabei die prak-

tischen Aspekte und Anforderungen aus den Augen zu verlieren.

Im Rahmen von ROBUKOM werden im Wesentlichen zwei Arten von Unsicherheiten betrachtet:⁵ Unsicherheit im Hinblick auf das Verkehrsaufkommen und Unsicherheit über mögliche Ausfälle. Erstere betrifft Abweichungen im Verkehr, die auf natürliche Weise entstehen: Die Menge der übertragenen Daten verändert sich im Laufe der Zeit und erreicht Spitzenwerte, die deutlich vom Durchschnittswert abweichen können. Die Auslegung des Netzes auf Grundlage des (unwahrscheinlichen) gleichzeitigen Auftretens aller Spitzenwerte (vgl. Abb. 2) wäre zu teuer, denn sie würde die Installation von großen Kapazitäten erforderlich machen, welche jedoch die meiste Zeit über gar nicht genutzt würden. Die zweite Art der Unsicherheit betrifft Ausfälle von Netzwerkkomponenten: Knoten und Verbindungen eines Netzes fallen aus einer Vielzahl von Gründen aus, z. B. weil Kabel bei Bauarbeiten durchtrennt werden oder es zu Funktionsstörungen in der technischen Ausrüstung kommt. Das Netzwerk sollte ausreichend redundant ausgelegt sein, um schnell Ersatz für unterbrochene Kommunikationswege zu schaffen, ohne dass die Nutzer davon beeinträchtigt werden. Ähnlich wie im ersten Fall würde eine „zu hohe“ Redundanz, die Schutz vor extremen Ausfallszenarien bietet (wenn zahlreiche Komponenten gleichzeitig ausfallen), ein zu teures Netz erforderlich machen, bei dem ein großer Teil der vorgehaltenen Kapazität über längere Zeit hinweg ungenutzt bliebe.

Um Schutz vor Datenunsicherheit zu bieten, ohne in übermäßigen Konservatismus zu verfallen, sind daher spezielle Ansätze nötig. In ROBUKOM untersuchen wir neueste Modelle und Algorithmen im Bereich der Robusten



▲ Abb. 2:
Verkehr auf drei verschiedenen Verbindungen in einem Netz; von den Durchschnittswerten abweichende Spitzen treten selten zu gleicher Zeit auf.³

◀ Abb. 1:
Wissenschaftsnetz X-WiN des Deutschen Forschungsnetzes.²

¹A. Koster, C. Helmberg, A. Bley, M. Grötschel, and T. Bauschert. **BMBF Project ROBUKOM: Robust Communication Networks**. In Proceedings of the ITG Workshop Euro View. VDE Verlag, 2012 ²<http://www.dfn.de/xwin> ³C. Raack. **Capacitated Network Design – Multi-Commodity Flow Formulations, Cutting Planes, and Demand Uncertainty**. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2012. URL <https://www.createspace.com/3934530> ⁴A. Bley, F. D'Andreagiovanni, and A. Hanemann. **Robustness in communication networks: Scenarios and mathematical approaches**. In Proceedings of the ITG Symposium on Photonic Networks, number 228 in ITG Fachbericht, pages 105–112. VDE Verlag, 2011



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Der Umgang mit Unsicherheiten im Netzwerkdesign ist eine Herausforderung, die in realen Telekommunikations-Netzwerkumgebungen nicht länger ignoriert werden kann. Das Projekt ROBUKOM zielt darauf ab, Optimierungsmodelle und Algorithmen zu entwickeln, die Abweichungen im Verkehrsaufkommen und Ausfälle von Netzwerkkomponenten berücksichtigen. Die ZIB-Forschungsgruppe konzentriert sich auf die Entwicklung eines neuen Multiband-Abweichungsmodells für Robuste Optimierung, das das klassische Einbandmodell von Bertsimas und Sim erweitert, dessen Eleganz, Einfachheit und rechnerische Durchführbarkeit jedoch beibehält.

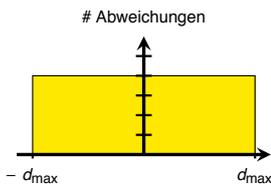


Abb. 3: ▲

Abweichungsintervall beim Einband-Modell

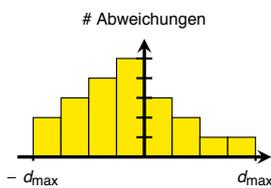


Abb. 4: ▲

Abweichungsintervall beim Multiband-Modell

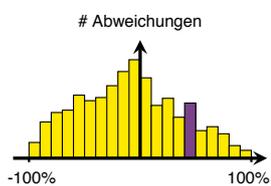


Abb. 5: ▲

Histogramm von gemessenen Daten; der dunkle Balken kennzeichnet die Anzahl der Koeffizienten mit Abweichung zwischen 40% und 50% vom erwarteten Wert.

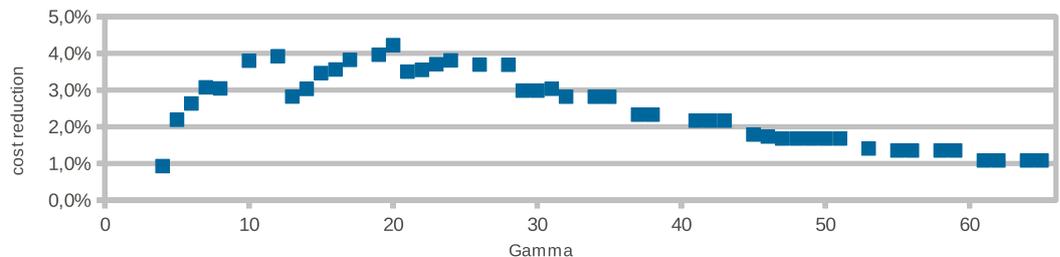
Abb. 6: ►

Kostensparnis bei der Verwendung des Multiband-Modells gegenüber dem klassischen Bertsimas-Sim-Modell

Optimierung. Ein wesentliches Merkmal in der Robusten Optimierung ist die Einführung zusätzlicher Nebenbedingungen, die Lösungen ausschließen, die nicht gegenüber „ungünstigen“ Abweichungen von Koeffizienten geschützt sind. Hierfür haben wir ein Unsicherheitsmodell entwickelt, welches das klassische, von Bertsimas und Sim eingeführte Modell erweitert und verfeinert. Das Bertsimas-Sim-Modell⁵ geht davon aus, dass jeder unsichere Koeffizient innerhalb eines symmetrischen Intervalls (Bands) variiert, das um den erwarteten Wert zentriert ist (Abb. 3) und zudem höchstens Γ verschiedene Koeffizienten zu einem gegebenen Zeitpunkt von ihrem jeweiligen erwarteten Wert abweichen. Die Verwendung eines einzigen, symmetrischen Bands für die Verteilung schränkt jedoch die Möglichkeiten für die Optimierung sehr stark ein: Im Bertsimas-Sim-Modell tauchen nur noch die Extremwerte auf, was zu einer unrealistischen und unnötig großen Unsicherheitsmenge führt, falls z. B. die Abweichungen von den erwarteten Werten asymmetrisch verteilt sind. Für praxisnahe Anwendungen wird daher ein realistischeres Modell mit einer besseren Auflösung des Abweichungsbands benötigt. Dies wird dadurch erreicht,⁶ dass das gesamte Intervall in mehrere kleine Bänder aufgeteilt wird, von denen jedes einen eigenen Maximalwert Γ für die Anzahl der abweichenden Koeffizienten hat (Abb. 4). Dieses Modell ist besonders nützlich, wenn historische Daten über die Unsicherheit zur

Verfügung stehen, beispielsweise durch Verkehrsmessungen; so kann die Verteilung von beobachteten Daten besser (vgl. Abb. 5) angenähert und effektiv in ein Optimierungsmodell überführt werden. In der Tat führt dieses Modell zu weniger konservativen und damit kostengünstigeren Lösungen, wie erste Testrechnungen nahelegen (Abb. 6).

Aus mathematischer Sicht führt der Übergang vom Einband- zum Multiband-Modell dazu, dass sich einige Resultate von Bertsimas und Sim nicht mehr so einfach übertragen lassen. Wir konnten jedoch einige Eigenschaften zeigen, welche für die Lösbarkeit robuster gemischt-ganzzahliger linearer Programme (MILP) besonders wichtig sind.⁷ Zum einen ist ein auf dem Multiband-Modell basierendes robustes MILP kompakt, das heißt, aufgrund der Robustheit kommt nur eine polynomiale Anzahl von Variablen und Bedingungen zusätzlich ins Spiel; darüber hinaus ist es linear, das heißt, es bleibt ein (kontinuierliches) lineares Programm, falls die Version ohne Berücksichtigung von Robustheit bereits ein solches war. Zum anderen kann die Separation von Kandidaten für eine robuste Lösung (robustness cut) durch das Lösen eines Min-Cost-Flow-Problems ausgeführt werden; dies impliziert, dass die Identifikation von nicht-robusten Lösungen in einem Schnittebenenverfahren, bei dem die Robustheitsbedingungen im Laufe des Lösungsprozesses sukzessive hinzugefügt werden, effizient ist.



⁵ D. Bertsimas and M. Sim. **The price of robustness**. Operations Research, 52(1):35–53, 2004 ⁶ C. Büsing and F. D'Andreagiovanni. **New results about multi-band uncertainty in robust optimization**. In Proceedings of the 11th International Conference on Experimental Algorithms, SEA 2012, pages 63–74. Springer Verlag, 2012 ⁷ C. Büsing and F. D'Andreagiovanni. **Robust Optimization under Multi-band Uncertainty – Part I: Theory**. ZIB Report 13-10, ZIB, Takustr. 7, 14195 Berlin, 2013. URL <http://opus.kobv.de/zib/volltexte/2013/TODO>

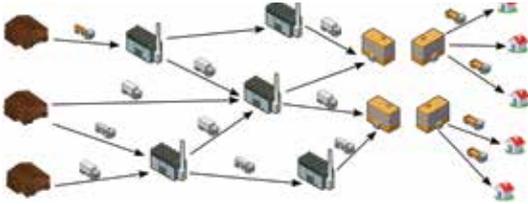
SUPPLY CHAIN MANAGEMENT

ENTWICKLUNG NEUER METHODEN DER LINEAREN UND GANZZAHLIGEN PROGRAMMIERUNG ZUR LÖSUNG VON SUPPLY-CHAIN-MANAGEMENT-PROBLEMEN

Bearbeitet von: Gerald Gamrath, Thorsten Koch, Matthias Miltenberger

Kooperation/Förderung: SAP Deutschland AG & Co. KG, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Weitere Informationen unter: <http://www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/scm>



Supply-Chain-Management (SCM) beschäftigt sich mit der Optimierung der Wertschöpfungskette eines Unternehmens. Dies fängt bei der Wahl der Zulieferer an und reicht bis zur Auslieferung produzierter Güter an den Kunden. Dazwischen werden Entscheidungen über Einkauf, Transport, Lagerung und Weiterverarbeitung der Güter getroffen. Die Wertschöpfungskette ist symbolisch in Abb. 1 dargestellt. Eine zentrale Rolle nimmt hierbei die Produktionsplanung ein: Basierend auf gegebenen Kundenbestellungen oder der prognostizierten Nachfrage entscheidet sie, wann welche Produkte wo produziert werden. Dabei stellt sie sicher, dass die für die Produktion benötigten Materialien am jeweiligen Standort im ausreichenden Maße vorhanden sind, berücksichtigt Kapazitätsrestriktionen, wie z. B. die Anzahl der verfügbaren Arbeiter, und versucht, Lagerkosten durch möglichst späte Produktion zu reduzieren.

Die integrierte Planung des gesamten Wertschöpfungsprozesses beinhaltet ein hohes Optimierungspotenzial und ist daher von großer Bedeutung für die Wirtschaftlichkeit von Unternehmen. Unser Industriepartner SAP entwickelt eine Software, die Unternehmen die Möglichkeit bietet, ihre Wertschöpfungskette detailliert zu modellieren. Dies beinhaltet u. a. genaue Beschreibungen der Produktionsmodelle, Kapazitätsrestriktionen, Produktions-, Lager-, Transport- und Lieferkosten. Für verschiedene

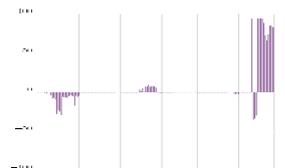
Zeitperioden (z. B. Tage oder Wochen) werden außerdem feststehende Warenzugänge, Kundenbestellungen und Nachfrageprognosen angegeben. Zur Optimierung der Supply-Chain wird aus diesen Daten dann ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsproblem (MIP) generiert. Im folgenden Optimierungsprozess kommt es weniger auf exakte Optimallösungen an, als vielmehr auf verlässliche und zulässige Lösungen, die schnell berechnet werden, um bei der Planung und Organisation komplexer Versorgungsnetze eingesetzt werden zu können.

Ziel dieses Projekts ist es, die akademische Softwarebibliothek der **SCIP Optimization Suite** so an die Problemstellung anzupassen, dass sie für diesen Zweck effektiv eingesetzt werden kann. Dazu werden sowohl bestehende Komponenten verbessert als auch neue entwickelt. Hierfür wurden vom Industriepartner eine Vielzahl anonymisierter Testinstanzen bereitgestellt, die aus dem aktuellen Betrieb stammen. Dabei handelt es sich um verschiedene Kundenmodelle, die in unterschiedlichen Verfeinerungsstufen vorliegen. So variiert die Größe der Instanzen zwischen eher klein, mit wenigen tausend Variablen und Bedingungen, und sehr groß, mit mehreren Millionen Variablen und Nebenbedingungen. Die meisten der Instanzen enthalten Ganzzahligkeitsbedingungen für einen Teil der Variablen. Für diese ist ein festes Zeitlimit vorgegeben, in dem eine zulässige Lösung gefunden werden muss. Die restlichen Instanzen stammen aus Modellen, die zu komplex sind, um in annehmbarer Zeit mit Ganzzahligkeitsbedingungen gelöst zu werden, weswegen sie als reines LP¹ modelliert wurden. Im Laufe des Projekts sind die Instanzen in regelmäßigen Abständen aktualisiert und mit unserer Hilfe verbessert worden.

◀ Abb. 1:
Symbolische Darstellung eines Supply-Chain-Netzwerks. Materialien werden bei Zulieferern (links) eingekauft und in Fabriken (Mitte links) zu Zwischen- und Endprodukten weiterverarbeitet. Endprodukte werden zu Distributionszentren (Mitte rechts) transportiert und von dort an Kunden (rechts) ausgeliefert.

$$\frac{pb_{Ref} - pb_{SCIP}}{\max\{pb_{Ref}, pb_{SCIP}\}} \cdot 100$$

▲ Abb. 2:
Bewertungsfunktion: pb ist der Zielfunktionswert der besten im Zeitlimit gefundenen Lösung.



▲ Abb. 3:
Vergleich der **SCIP Optimization Suite** mit dem Referenzlöser. Auf einem Großteil der Instanzen sind beide gleichwertig, auf einigen (links) besteht noch Verbesserungs-potenzial, während auf anderen (Mitte, rechts) ein besseres Lösungsverhalten erzielt wird.

¹ Lineares Programm



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Projekt beschäftigt sich mit der schnellen Lösung vor allem numerisch anspruchsvoller und großer Instanzen aus dem Supply-Chain-Management. Hierbei ist nicht primär die Optimallösung gesucht, sondern eine möglichst gute Lösung innerhalb fest vorgegebener Zeitbeschränkungen. Zur Berechnung wird die **SCIP Optimization Suite** verwendet, die im Laufe des Projekts um neue Komponenten erweitert wurde. Außerdem wird die Modellgenerierung auf Industrieseite mit unserer Hilfe schrittweise verbessert, um grundlegende Probleme schon im Ansatz zu vermeiden.

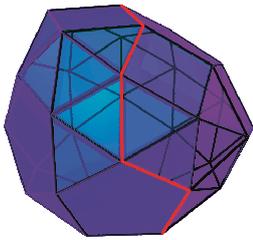


Abb. 4: ▲ Darstellung des Simplexalgorithmus.

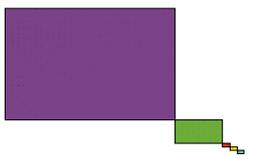


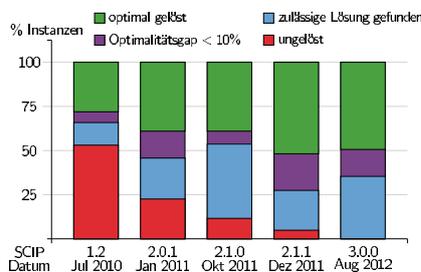
Abb. 5: ▲ Visualisierung der vom Komponentenpresolver erkannten Teilprobleme. Zeilen und Spalten sind so umsortiert, dass die Struktur der Matrix erkennbar wird. Der Presolver kann daraufhin die zu den vier kleineren Blöcken korrespondierenden Teilprobleme in wenigen Hundertstelsekunden zur Optimalität lösen und die Problemgröße damit um fast 30% reduzieren.

Um den Projektfortschritt zu messen, eignet sich die in Abb. 2 definierte Score-Funktion, die die beste von **SCIP** gefundene Lösung in Relation zu der des Referenzlösers setzt. Die aktuellen Scores der Testinstanzen sind in Abb. 3 dargestellt.

Eine numerische Schwierigkeit besteht in den mitunter sehr unterschiedlich großen Koeffizienten der Modelle, die sich bis zu Größenordnungen von mehreren Milliarden unterscheiden können. Probleme dieser Art sind überaus schlecht konditioniert² und numerisch schwierig zu handhaben. So lassen sich einige Probleme nur dann korrekt lösen, wenn die Rechengenauigkeit verfeinert, das heißt, die Zulässigkeitstoleranz verschärft wird. Da die Kondition eine Eigenschaft des Problems selbst ist, kann sie nur bedingt algorithmisch behandelt werden und erfordert vielmehr eine vorausschauende Modellierung. Daher ist ein weiteres Ziel des Projekts, die Modellierungsschnittstelle zu verbessern und die Anwender und Designer für diese Problematik zu sensibilisieren. In Abb. 6 lässt sich der Fortschritt in Bezug auf die Lösbarkeit der Instanzen ablesen. So werden mit der aktuellen Version der **SCIP Optimization Suite** innerhalb der vorgegebenen Zeit Lösungen für alle Instanzen gefunden, wobei ca. die Hälfte der Probleme zur Optimalität gelöst wird und für weitere 15% der Instanzen der Optimalitäts-gap unter 10% liegt.

Es wurden zahlreiche Codeverbesserungen und Neuimplementierungen vorgenommen, um diese Ergebnisse zu ermöglichen. Zum einen sind hier Verbesserungen in **SoPlex**³ zu nennen, die die Berechnungen der LP-Relaxierungen im MIP-Lösungsprozess beschleunigen. Es gab strukturelle Neuentwicklungen im Pricing, also der Pivotauswahl im Simplexalgorithmus, und im Ratio-Test, welcher hauptverantwortlich für die Stabilität des Verfahrens ist. Ein weiterer wichtiger Punkt sind Arbeiten im Bereich des Presolvings⁴. Es ist speziell unter den Bedingungen dieses Projekts von großer Wichtigkeit, eine gute Presolving-Strategie zu haben. Auf der einen Seite sollen viele Fixierungen und Vereinfachungen gefunden werden, um das spätere Lösen zu beschleunigen, auf der anderen Seite muss nach dem Presolving noch genug Zeit bleiben, um Lösungen zu finden. Besonders hervorzuheben ist hierbei der Komponentenpresolver, der hauptverantwortlich für den großen Fortschritt zwischen Version 2.1.0 und 2.1.1 ist (siehe Abb. 6). In den Instanzen sind oft einzelne Standorte oder Produktlinien vollständig unabhängig von dem Rest des Problems. Der Presolver erkennt diese Teilprobleme und löst sie separat. Dies geschieht vollständig automatisch und lässt sich sehr effizient einsetzen. Einige der Instanzen zerfallen in mehrere hundert unabhängige Teilprobleme. Die Matrixstruktur einer Instanz mit fünf unabhängigen Problemen ist in Abb. 5 dargestellt. In Planung sind außerdem problemspezifische Heuristiken, also Verfahren, welche Kenntnisse über die Beschaffenheit des Problems ausnutzen, um zulässige Lösungen zu erzeugen. Darüber hinaus sind weitere Dekompositionstechniken denkbar, die in jedem Schritt immer nur einen Teil der Produkte oder Perioden betrachten, obwohl diese im Gegensatz zu der aktuell durchgeführten Dekomposition nicht unabhängig vom Rest des Problems sind.

Abb. 6: ► Prozentuale Verteilung aller MIPs in vier Klassen und deren Entwicklung im Laufe des Projekts. Mit der neuesten Version werden zu allen Problemen zulässige Lösungen gefunden.



²Die Kondition eines Problems ist die Variabilität der Lösung bei Störungen in den Ausgangsdaten. ³**SoPlex** ist eine Implementierung des Simplexalgorithmus und Teil der **SCIP Optimization Suite**. ⁴Presolving bezeichnet Problemreduzierungen und -vereinfachungen, die vor dem eigentlichen Lösen durchgeführt werden.

MATHEMATIK IN DER KONFERENZPLANUNG

OPTIMIERTER PROGRAMMPLAN FÜR DIE ISMP2012

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Alexander Tesch

Weitere Informationen unter: <http://ismp2012.mathopt.org/>



Das International Symposium on Mathematical Programming (ISMP) ist die größte Konferenz im Bereich der mathematischen Optimierung. Alle drei Jahre findet sie in einer anderen Stadt auf der Welt statt. Für den 19.–24. August 2012 war Berlin als Veranstaltungsort gewählt worden (Abb. 1 und 3). Die Hörsäle und Räume der TU Berlin sollten dafür genutzt werden, den rund 2000 Besuchern ausreichend Platz für fachlichen Austausch und interessante Vorträge zu gewähren. Das ZIB wurde dabei mit der Aufgabe betraut, einen Programmablaufplan für die Konferenz zu erstellen.

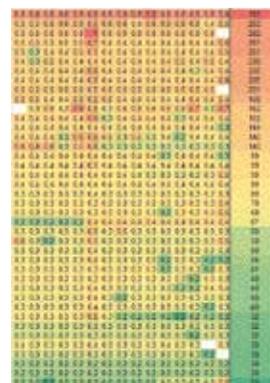
Die ISMP2012 war die größte Optimierungstagung, die jemals stattfand (Tab. 1 und 2).



Rund 1700 angemeldete Vorträge mussten auf 600 „Sessions“ zu je drei Vorträgen verteilt werden, die dann zu täglich drei festen Vortragszeiten stattfinden sollten. Um die große Anzahl an Vorträgen unterbringen zu können, fanden zu jedem Zeitpunkt 40 Sessions gleichzeitig in verschiedenen Räumen statt.

Das Planungsproblem bestand darin, allen Sessions einen festen Vortragszeitpunkt und einen festen Raum zuzuordnen. Dabei waren sehr viele Bedingungen einzuhalten, was eine Planung per Hand nahezu unmöglich machte. Daraufhin wurde eigens für diese Konferenz eine Optimierungssoftware entwickelt. Unser Ansatz zerlegt das Grundproblem in drei kleinere, einfachere Teilprobleme, die nacheinander gelöst werden. Die Teilprobleme gliedern sich dabei in: zeitliche Zuordnung, Zuordnung zu „Streams“ und räumliche Zuordnung von Sessions. Die zeitliche Zuordnung teilt jeder vorhandenen Session einen festen Vortragszeitpunkt in der Konferenz zu. Dabei wird beachtet, dass zu jedem Zeitpunkt nur die Sessions stattfinden, die bezüglich einer prognostizierten Teilnehmeranzahl in die vorhandenen Räume passen. Diese hatten unterschiedliche Kapazitäten von 20 bis 390 Sitzplätzen. Das Programm verwendet zur Prognose ein integriertes Attraktivitätsmodell, das die erwarteten Teilnehmerzahlen für jede Session berechnet. Zudem wird dahingehend optimiert, dass thematisch ähnliche sowie sehr beliebte Sessions über die Länge der Konferenz gleichverteilt werden (Abb. 2 und 6). Damit soll ein gleichmäßig interessantes Programm für die gesamte Dauer der Konferenz gesichert werden. Hinzu kamen 250 zusätzliche individuelle Anfragen seitens der Vortragenden. Beispielsweise haben viele Teilnehmer einen Termin für ihren Vortrag priorisiert, da ihnen ein Verbleib über die gesamte Konferenz nicht möglich war.

◀ Abb. 1:
Das Logo der ISMP2012.



▲ Abb. 2:
Verteilung von populären Sessions (rot) auf Räume mit unterschiedlichen Kapazitäten (rechts).

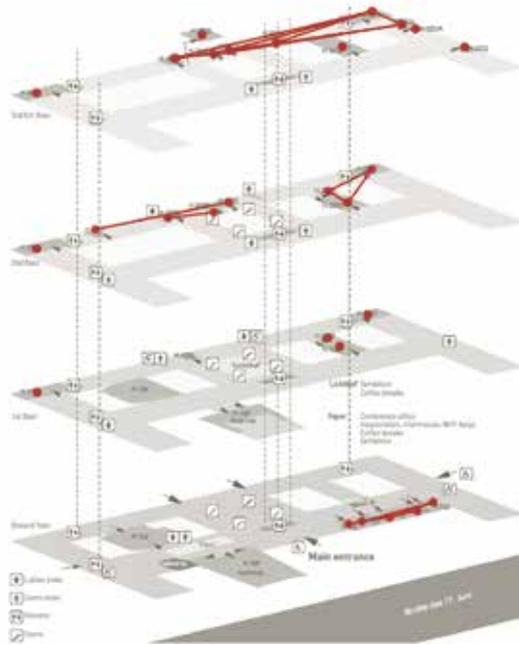
◀ Abb. 3:
Im Konzerthaus am Gendarmenmarkt fand die Eröffnungsveranstaltung der ISMP2012 statt. Dort wurden zahlreiche Preise der Mathematical Optimization Society (MOS) verliehen.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Für die ISMP2012 sollte ein Programmplan für den Ablauf der 600 angemeldeten Sessions erstellt werden. In der Woche der Konferenz fanden zu täglich drei Vortragszeiten 40 parallele Sessions statt. Dafür musste jeder Session ein fester Raum- und Zeitslot zugewiesen werden, wobei Überlagerungen von verschiedenen Sessions ausgeschlossen werden mussten. Es wurde unter anderem nach folgenden Kriterien optimiert: gleichmäßige Themenverteilung, gleichmäßige Verteilung von attraktiven Sessions, Zuordnung von attraktiven Sessions in große Räume, individuelle Terminanfragen und Minimierung der Raumwechselzeiten.

Abb. 4: ▶

Kurze Wege zwischen ähnlichen Sessions.



abschließenden räumlichen Zuordnung wird jedem Stream ein Raum zugewiesen. Dabei sollen Streams, die thematisch ähnliche Sessions enthalten, in nah beieinander liegenden Räumen stattfinden (Abb. 4). Für die kurzen Pausen zwischen den Vorträgen werden so die Laufwege deutlich verkürzt. Hektische Wechsel zwischen Stockwerken oder gar zwischen den zwei verwendeten Gebäuden werden ausgeschlossen.



Abb 5: ▲

SPIEGEL-Online veröffentlicht einen Artikel über die Optimierung des ISMP2012-Konferenzplans.

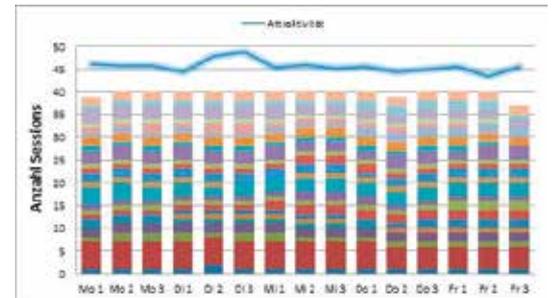


Abb. 6: ▶

Zeitliche Verteilung von Clustern und Attraktivität der Sessions.

Solche Nebenbedingungen werden bei der zeitlichen Zuordnung ebenfalls berücksichtigt. Im nächsten Optimierungsschritt werden Sessions zu sogenannten Streams zusammengefasst. Ein Stream beschreibt eine Sequenz von Sessions, die zeitlich aufeinanderfolgend in einem Raum stattfinden, vorerst ohne einem konkreten Raum zugeordnet zu sein. Hierbei sollen thematisch ähnliche Vorträge zeitlich nacheinander innerhalb desselben Streams stattfinden. Auf diese Weise soll ein Bezug zwischen dem Raum und den dort vorgestellten Themen geschaffen werden. Die Orientierung für die meist internationalen Gäste wird denkbar erleichtert. Bei der

Die Programmoptimierung war ein voller Erfolg. Eine Konferenzplanung dieser Art gab es unseres Wissens bisher noch nicht. SPIEGEL-Online berichtete zu diesem Anlass direkt von der ISMP in dem Artikel: „Das optimieren wir mal“ (Abb. 5).

Tab. 1: ▶

Die Zahlen im Vergleich: CPAIOR am Konrad-Zuse-Institut und die ISMP2012 an der TU-Berlin.

	CPAIOR '11	ISMP 2012
Teilnehmer	150	2.191
Teilnehmerländer	19	68
Talks	37	1.741
Sessions	9	595
Cluster	4	24
parallele Streams	1	40

Tab. 2: ▶

Die Besucher der ISMP2012 kamen aus 68 Ländern von sechs Kontinenten.

Nation	Deutschland	USA	Frankreich	Brasilien	Großbritannien	Italien	Kanada	Niederlande	Japan	Österreich	China	Schweiz	Schweden	Spanien	Russland	Indien	Belgien	Singapur	Chile	Israel	Türkei	Portugal
Teilnehmerzahl	477	452	127	99	84	74	65	59	55	53	46	44	37	35	35	32	31	26	25	24	24	24

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: M. Grötschel, C. Raack, R. Wessäly

Partner: atesio, DFN-Verein, Nokia Siemens Networks, 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, 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, B. Hiller, M. Grötschel, A. Gleixner, S. Heinz, T. Koch, S. Vigerske (HU Berlin), K. Wolter, F. Serrano

Partner: MATHEON-B15, MATHEON-C7, ForNe, TU Braunschweig, TU Darmstadt, HU Berlin, Siemens, 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

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: T. Berthold, M. Grötschel, T. Koch, C. Raack, Y. Shinano

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: A. Gleixner, M. Grötschel, T. Koch

Partner: Siemens, TU Darmstadt

Forschungsförderung: Siemens

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

ugFRAME

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

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

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

Forschungsförderung: Open Grid Europe

Inhalt: Analyse und Optimierung von Gas-transportnetzen.

BMW-GASNET

Kapazitätsauswirkungen von Netzerweiterungen und Netzzusammenlegungen

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

Mitarbeiter: B. Hiller, J. Humpola, T. Koch, R. Schwarz, J. Schweiger

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.

SASER

Safe and Secure European Routing

URL: <http://www.zib.de/de/projekte/aktuelle-projekte/projekte-detail/article/saser-siegfried-1.html>

Mitarbeiter: F. D'Andreagiovanni, F. Pfeuffer, A. Werner

Partner: TU Berlin, Nokia Siemens Networks

Forschungsförderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF, EUREKA)

Inhalt: Potential von flexiblen Bit-Raten und dynamischem Verkehr in zukünftigen optischen Netzen.

MULTIPERIOD NETWORK OPTIMIZATION

Planung beweisbar optimaler Telekommunikationsnetze

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

Mitarbeiter: M. Grötschel, J. Pulaj

Partner: Warsaw University of Technology, Department of Computer Networks and Switching

Forschungsförderung: DFG, Ministerium f. Bildung u. Wissenschaft, Polen

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

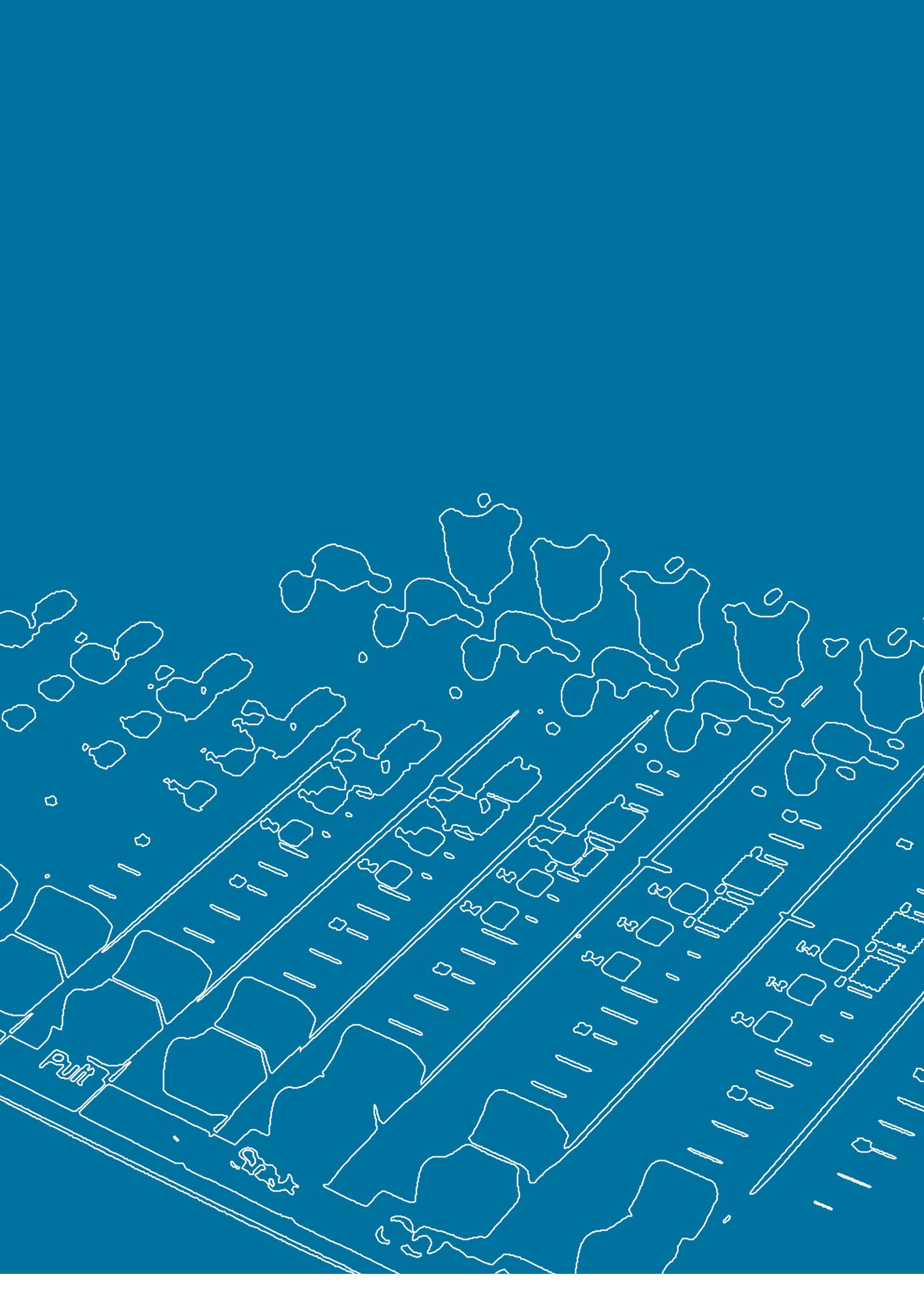
ROBUKOM**Robuste Kommunikationsnetze****URL:** www.robukom.de**Mitarbeiter:** F. D'Andreagiovanni, M. Grötschel**Partner:** RWTH Aachen University, Lehrstuhl II für Mathematik, TU Berlin, Arbeitsgruppe Kombinatorische Optimierung und Graphenalgorithmen, TU Chemnitz, Arbeitsgruppe Algorithmische und Diskrete 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.**VS-OPT-RAIL****Mehrtägige zyklische Umlaufplanung für Züge****URL:** www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte-lang/vs-opt-rail.html**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, C. Schulz, S. Weider**Partner/Finanzierung:** LBW, IVU Traffic Technologies**Inhalt:** Entwicklung eines Verfahrens zur zyklischen Umlaufoptimierung im Sinne einer „Giant Rotation“**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, MATHEON Projekt B24: Scheduling Material Flows in Logistics Networks**Forschungsförderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)**Inhalt:** Fahrtrassenallokation im Schienen-güterverkehr.**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

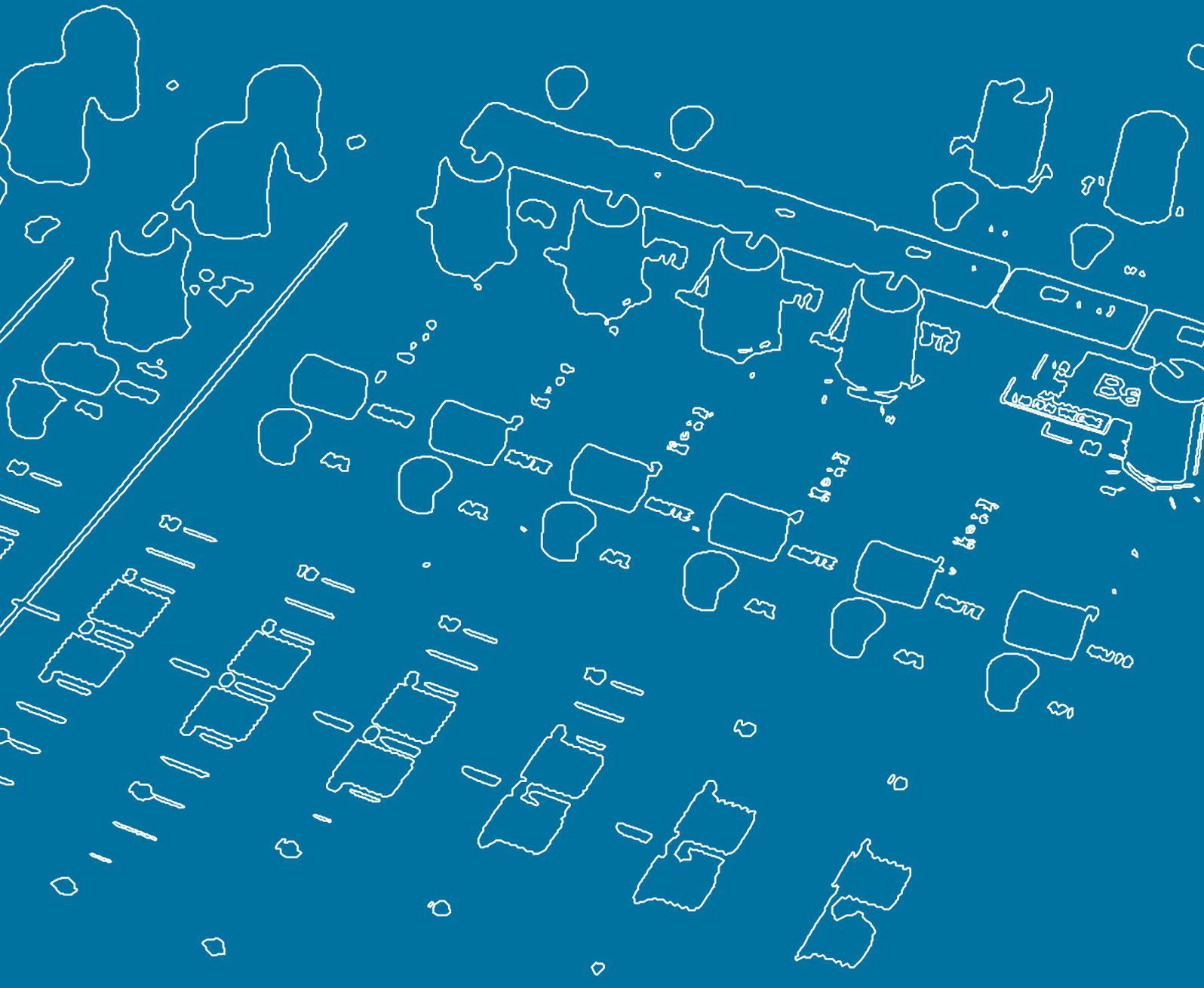
Inhalt: Planung der Touren und Dienste der mobilen Kontrollteams für die LKW-Maut auf deutschen Autobahnen.**WS-OPT****Zyklische Dienstreihenfolgeplanung im öffentl. Nahverkehr****URL:** www.zib.de/de/optimierung/traffic/projekte-lang/ws-opt.html**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, C. Schulz, S. Weider**Partner/Finanzierung:** LBW, IVU Traffic Technologies**Inhalt:** Entwicklung eines Verfahrens zur Wochenschemaoptimierung.**DESI****Durchgängig energiesensible IKT-Produktion****URL:** www.desi-it2green.de**Mitarbeiter:** I. Olthoff, F. Pfeuffer, A. Werner
Partner: Deutsche Telekom AG, Laboratories, Alcatel-Lucent Deutschland AG, Joulex GmbH, PASM Power and Air Condition Solution Management GmbH**Forschungsförderung:** Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi, IT2Green-Programm)**Inhalt:** Energieeffizienz in Telekommunikationsnetzen.**SAP****Neue Technologien zur Lösung von SCM-Problemen****URL:** www.zib.de/Optimization/Projects/MIP/scm**Mitarbeiter:** G. Gamrath, T. Koch, M. Miltenberger**Partner:** SAP, U Erlangen-Nürnberg**Forschungsförderung:** SAP**Inhalt:** Entwicklung neuer Methoden der linearen und ganzzahligen Programmierung zur Lösung von Supply-Chain-Management-Problemen.**MULTI-FTTX****Multikriterielle Optimierung zur Planung von FTTx-Netzen****URL:** <http://www.zib.de/de/optimierung/projekte/projektetails/article/multifttx.html>**Mitarbeiter:** M. Grötschel, A. Werner**Partner:** Universität Wien, TU Wien**Forschungsförderung:** DFG-D-A-CH-Förderung.**Inhalt:** Entwicklung von multikriteriellen Optimierungsmodellen und algorithmischen Ansätzen für die Glasfaserzugangnetzplanung.**SFB – SUSTAINABLE MANUFACTURING (Teilprojekte A5 und A6)****URL:** www.zib.de/de/optimierung/mip/projekte-lang/sfb1026-sustainable-manufacturing/article/sfb-1026-sustainable-manufacturing.html**Mitarbeiter:** R. Borndörfer, A. Fügenschuh, S. Schenker, I. Vierhaus**Partner:** TU Berlin, BA f. Materialprüfung, Fraunhofer IPK, WZB**Finanzierung:** DFG**Inhalt:** Entwicklung mathematischer Methoden zur Lösung von multikriteriellen (A5) und systemdynamischen (A6) Optimierungsproblemen beim Entwurf nachhaltiger Wertschöpfungsnetze.**TURAN****Das hypergraphische Turan-Problem****Mitarbeiter:** A. Raymond**Forschungsförderung:** ZIB Stipendium**Inhalt:** Polyedrische Untersuchung des hypergraphischen Turan-Problems.





WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

Yes, we can!



WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

Leitung: Dr. Thorsten Koch

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/sis



Die Abteilung Wissenschaftliche Information besteht aus den Arbeitsgruppen

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

Wir verbinden 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 Hochschuleinrichtungen und wissenschaftlicher Institute.

Im Berichtszeitraum ist es gelungen, mit der Servicestelle Digitalisierung (digiS) ein besonders ambitioniertes Projekt des Landes Berlin in der Abteilung aufzubauen. Berlin spielt hier eine Vorreiterrolle für eine spartenübergreifende Koordinierung von Digitalisierungsprojekten. In unserem neuen Projekt EWIG wird zudem

der Aspekt der langfristigen Speicherung von Forschungsdaten in Kooperation mit dem Geo-ForschungsZentrum in Potsdam und dem Institut für Meteorologie der FU Berlin untersucht.

Die Arbeitsgruppe Informationssysteme entwickelt Anwendungen, um mathematische Dokumente automatisch zu klassifizieren und mithilfe bibliometrischer Analyseverfahren Ähnlichkeitsuntersuchungen 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 Museumsprojekt betreut seit vielen Jahren die von ihr entwickelte auf Dokumentation und Inventarisierung spezialisierte Datenbankanwendung.

Die erfolgreiche Software ist bei über zehn Kooperationspartnern im Einsatz.

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.

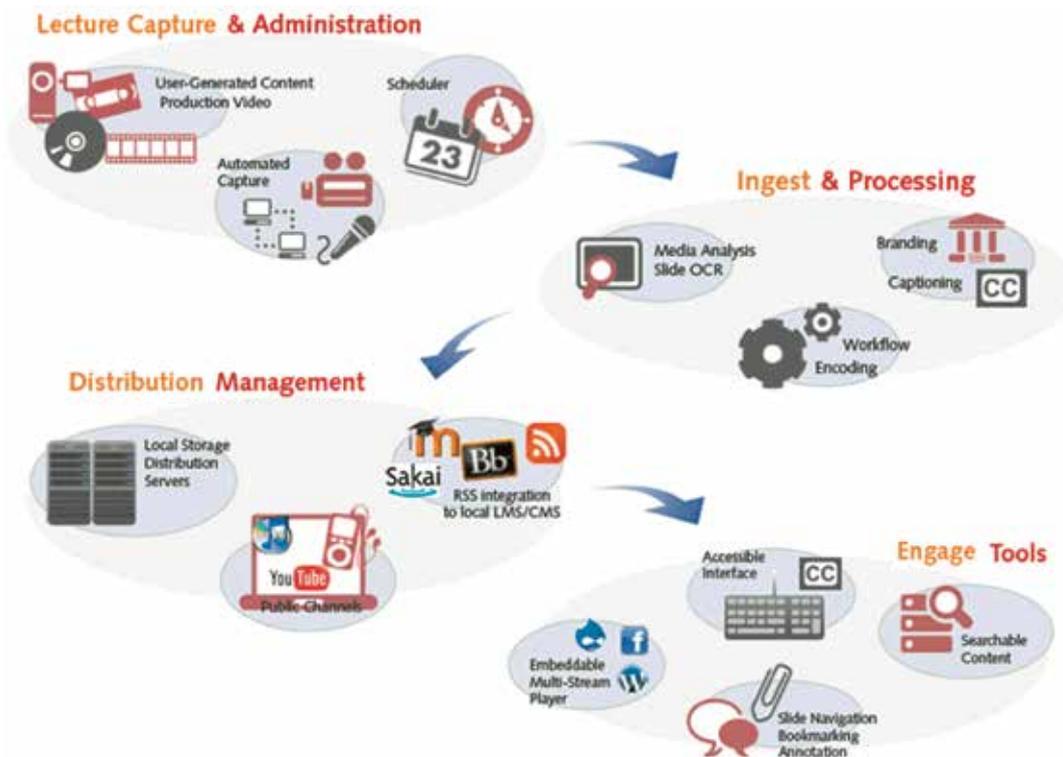
Im Berichtszeitraum wurde der Internetauftritt des 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP) in der Arbeitsgruppe realisiert. Mit über 1.700 Vorträgen und 2.000 Teilnehmern ist dieser Kongress eine der großen Veranstaltungen der internationalen Mathematik.

Zusätzlich wird weiterhin die Erfassung von einzelnen Veranstaltungen auf Videomaterial erprobt. Die inhaltliche und strukturelle Weiterverarbeitung dieses Materials steht dabei im Mittelpunkt. Mit der Opensource Software Matterhorn steht erstmals auch ein für unsere Zwecke brauchbares Werkzeug zur Verfügung, welches zukünftig in der Arbeitsgruppe eingesetzt wird.

WEBTECHNOLOGIE UND MULTIMEDIA

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Tim Hasler (seit 05/2006)

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/si/web-technologie-und-multimedia.html



◀ Abb. 1:
Die Funktionen von OpenCast Matterhorn sind hier entlang eines Workflows durch die vier Komponenten des Systems abgebildet.
Quelle: <http://opencast.org/matterhorn/features>

E-LECTURE

Auch für Forschungseinrichtungen werden zukünftig Aufzeichnungen und Verbreitung von wissenschaftlich bedeutenden Veranstaltungen ein strategisch wichtiger Bereich. E-Lectures werden zunehmend als ein eigenständiger Publikationszweig aufgefasst und haben darüber hinaus die Bedeutung, Aspekte beim Vortragenden aufzuzeigen, die in bisherigen Publikationen naturgemäß nicht zum Tragen kommen können (Betonung, Mimik und Ausdruck)¹.

Die Arbeitsgruppe Webtechnologie und Multimedia hat im Berichtszeitraum die OpenSource Software OpenCast Matterhorn evaluiert und plant, zukünftig damit eigene Veranstaltungen aufzuzeichnen und zu verbreiten.

OpenCast Matterhorn² ist eine Multimediaumgebung, die die Möglichkeit bietet, (automatisiert) Vorträge aufzuzeichnen und aufzubereiten. Der Kontext hierzu ist üblicherweise der E-Learning Einsatz an Universitäten mit festem Veranstaltungsprogramm. Am ZIB ist das Einsatzszenario eher der Aufbau einer Sammlung von herausragenden Vorträgen. Aufgezeichnet wurden bisher Auslandsreisen von ZIB Mitarbeitern oder Gastvorträge bekannter Persönlichkeiten am ZIB selbst. In der nächsten Phase wird dieser Dienst auch auch den Lehrenden am ZIB angeboten, die ihren Veranstaltungen an der TU bzw. FU eine E-Learningkomponente hinzufügen wollen.

¹ <http://www.tagesspiegel.de/wissen/digitale-revolution-der-lehre-harvard-fuer-alle/7593300.html> (abgerufen 8.1.2013) ² <http://opencast.org/matterhorn/>



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Die Arbeitsgruppe Webtechnologie und Multimedia wird nach der erfolgreichen Evaluation, die Opensource Software Opencast Matterhorn einsetzen, um zukünftig eigene Veranstaltungen damit aufzuzeichnen und zu verbreiten. Matterhorn bietet eine hohe Flexibilität beim Aufzeichnen und bei der Verteilung der Vorträge über das Netz. Durch die weite Verbreitung im universitären Umfeld hat sich in den letzten Jahren eine stabile Community gebildet, die eine langfristige Nutzung garantiert.

Matterhorn greift auf eine Sammlung von Werkzeugen aus der Open Source Community zurück. Vermittelt durch ein Java Framework (Apache Felix) kommen hier Tools wie FFmpeg zur Videobearbeitung, OCRopus mit Tesseract zur Texterkennung oder SOLR zur Indexierten Suche zum Einsatz. Die Kommunikation der Module untereinander erfolgt über Java APIs oder im bevorzugt verteilten Fall über REST Services.

Matterhorn bietet die Möglichkeit, verschiedene Workflows zusammenzustellen, je nach gewünschtem Output, etwa für die populären iTunes University oder YouTube Channel. Dabei wird der Videostream in die gewünschten Formate transformiert, zur Ausgabe auf mobilen Geräten oder im Browserfenster in HD. Die Präsentation wird nach einer Videoanalyse komprimiert und einer Texterkennung unterzogen (eine Texterkennung aus dem Audiomaterial ist in der Entwicklung). Als Ergebnis sind

die Textinhalte der Präsentation durchsuchbar. Die Folienwechsel werden zur Segmentierung der Präsentation genutzt. So kann über eine Thumbnailvorschau direkt zu einer betreffenden Folie in der Präsentation gesprungen werden.

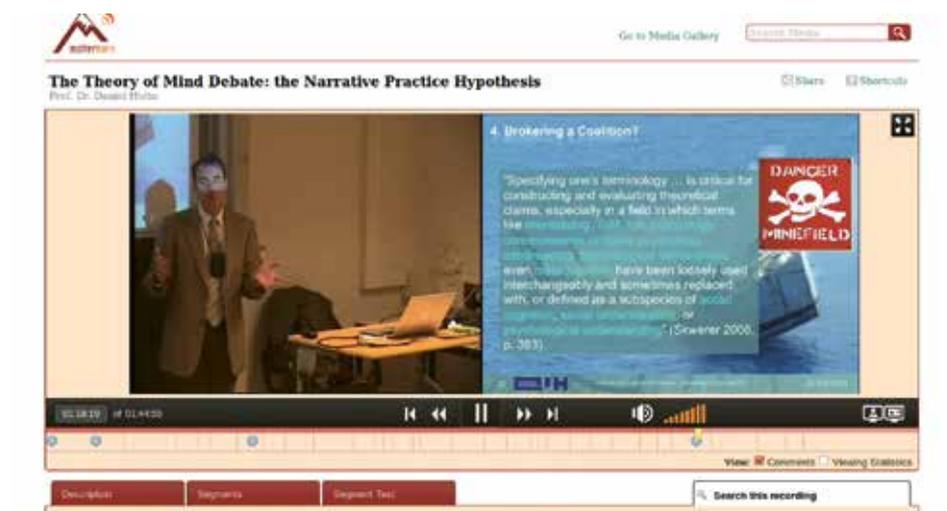
Dadurch, dass Präsentation und Vortragender in getrennten Aufzeichnungen vorliegen, kann der Nutzer beim Abspielen des Vortrages selbst entscheiden, wie er seinen Schwerpunkt setzen möchte, eher auf das Vortragen oder aber die Präsentation.

Nach den gemachten sehr guten Erfahrungen wird jetzt ein Produktivsystem mit drei Servern (Admin, Worker, Deployment) installiert. Opencast Matterhorn skaliert problemlos, so dass bei zusätzlichem Bedarf, beispielsweise im Deployment, weitere Server mit diesem Profil ins Framework aufgenommen werden können.

Abb. 2: ►

Der Matterhorn Engage Player bietet im Browserfenster ohne spezialisierte Software die Möglichkeit, die Größe der Videostreams zu verändern und zu einzelnen Segmenten der Vorlesung zu springen.

Quelle: Markus Ketterl, <http://opencast.jira.com/secure/attachment/12260/comment1.png>



KOOPERATIVER BIBLIOTHEKSVERBUND BERLIN-BRANDENBURG (KOBV)

Bearbeitet von: Steffi Conrad-Rempel, Hildegard Franck, Julia Goltz, Björn Kirchhoff (01-04/2012), Thorsten Koch, Renate Kraft, Monika Lill, Stefan Lohrum, Jannis Polojannis, Wolfgang Peters-Kottig, Beate Rusch, Alexander Sichwardt (seit 06/2012), Edouard Simon (seit 10/2012), Jens Schwidder, Sascha Szott, Doreen Thiede, Signe Weihe

Förderung: Senatskanzlei – Kulturelle Angelegenheiten; Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg

Kooperation: Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg

Weitere Informationen unter: <http://www.kobv.de>

STRATEGIEDISKUSSIONEN UND ZUKUNFTS- AUFGABEN

Wie muss die zukünftige Informationsinfrastruktur gestaltet sein, um die Wissenschaften am digitalen Arbeitsplatz angemessen unterstützen zu können? Sind die vorhandenen, föderalen Strukturen für drängende Fragen wie die Lizenzverwaltung von elektronischen Medien, die Unterstützung von Open Access, die Langzeitverfügbarkeit von digitalen Forschungsdaten und digitaler Reproduktionen und den Aufbau und Betrieb von intelligenten, virtuellen Wissenschaftlerarbeitsplätzen geeignet? Wie kann der Nachweis von Bibliotheksbeständen kostengünstiger organisiert werden? Wie stellt sich dabei das Verhältnis zwischen Verbänden als Serviceanbietern für Bibliotheken und den kommerziellen Softwareanbietern dar? Einem Vorschlag der Kultusministerkonferenz folgend hat der Wissenschaftsrat im Jahr 2011 in einem aufwändigen Verfahren die deutsche Verbundlandschaft auf ihre Zukunftsfähigkeit hin evaluiert. Organisatorisch und finanziell sehr unterschiedlich aufgestellt, differieren die sechs Bibliotheksverbände in Deutschland hinsichtlich ihrer Größe und ihrer technischen Ausrichtung und arbeiten dennoch in einem engen Geflecht aus Kooperationsbeziehungen miteinander. So gilt die deutsche Fernleihe international als vorbildlich. Historisch bedingt gibt es allerdings nur für die Zeitschriften nicht aber für Monografien einen nationalen Nachweis.

Für den Wissenschaftsrat standen nicht die einzelnen Organisationen im Mittelpunkt sondern das bibliothekarische Verbundsystem in der Gesamtheit, die erst aus der Zusammenschau der existierenden, weitgehend regional agierenden, sechs Bibliotheksverbände entsteht.

Aus dieser Perspektive erkennt der Wissenschaftsrat deutliche Redundanzen und Mehrfachangebote. In den „Empfehlungen zur Zukunft des bibliothekarischen Verbundsystems in Deutschland“ vom Februar 2011 sprach sich der Wissenschaftsrat dann auch für eine strukturelle Neuordnung aus, in der föderale Grenzen zugunsten einer neuen innovativen Arbeitsteilung aufgehoben werden.

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft hat sich diesem Votum angeschlossen und im Januar 2012 das Programm „Neuausrichtung überregionaler Informationsservices“ ausgeschrieben. Diese Förderung richtet sich ausdrücklich auch an die Bibliotheksverbände und hat eine bibliothekspolitische Neuordnung zum Ziel.

Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg versteht sich in dieser Diskussion als Vorbild. In der strategischen Allianz zwischen dem KOBV und dem Bayerischen Bibliotheksverbund BVB wird die geforderte Arbeitsteilung und Entwicklungskooperation bereits gelebt. Die Katalogisierung mit den nachfolgenden Datenflüssen wird für drei Bundesländer gemeinsam organisiert. In einer strategischen Entwicklungspartnerschaft werden gemeinsame Projekte gestaltet. Diese Kooperation ist als Partnerschaft auf Augenhöhe mit kooperativen Beteiligungsstrukturen ausgelegt und durch Vereinbarungen finanziell und organisatorisch festgeschrieben.

Dem DFG-Aufruf, Informationsservices für die Wissenschaften neu und gleichzeitig bundesweit auszurichten, ist der KOBV zusammen mit seinem strategischen Partner, dem Bibliotheksverbund Bayern, und weiteren Mitwirkenden mit drei Projektanträgen gefolgt.



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 (inkl. Gäste) sind 23 Universitäts- und Hochschulbibliotheken aus der Region, eine Bibliothek der privaten Hochschulen, beide Landesbibliotheken, die Staatsbibliothek zu Berlin, zehn Bibliotheken der Obersten Bundesbehörden und 43 Forschungs- und Spezialbibliotheken. Dazu kommen als Partner der Verbund Öffentlicher Bibliotheken Berlins und Verbund der Öffentlichen Bibliotheken des Landes Brandenburg.

Die Zukunft von bibliothekarischem Metadatenmanagement sehen KOBV und BVB ebenso wie der hessische Verbund HeBIS nicht national sondern international in Cloudstrukturen verankert. Diesen Übergang gilt es konzeptionell, organisatorisch und technisch frühzeitig zu begleiten. Dabei nehmen es die beteiligten Bibliotheken in Kauf, ihre Datenflüsse, Datenstrukturen und Systemarchitekturen grundlegend zu reorganisieren. Für den KOBV gilt nach wie vor die Gründungsmaxime der Heterogenität. Den Bibliotheken muss die Wahl ihrer Softwareumgebung frei gestellt bleiben, auch wenn sie sich in neuen internationalen Cloudstrukturen bewegen. In einem DFG-Projekt will sich der KOBV diesen Strukturen stellen, durch Standardisierung Entscheidungsfreiheit bei der Systemwahl gewährleisten und kommerziellen Monopolbildungen entgegenwirken. Dabei gilt es, die Hoheit über die Daten nicht zu verlieren und die vielfältigen existierenden Kooperationsbeziehungen aufrechtzuerhalten. Auch die Funktion von Verbundzentralen als regionale Ansprechpartner und Kümmerer gerade für kleine Bibliotheken ist neu zu definieren.



Als Zukunftsthema gewinnt die Langzeitverfügbarkeit von digitalen Medien eine immer stärkere Bedeutung. Hier will sich der KOBV mit weiteren potenten Partnern am Aufbau einer Nationalen Langzeitarchivierungsinfrastruktur für das kulturelle Erbe beteiligen. Mit dem KOBV, dem Projekt digiS und der Arbeitsgruppe Massendatenspeicher ist das ZIB hier abteilungsübergreifend aktiv. Das ZIB liefert eine exzellente Speicherinfrastruktur, auf der der KOBV archivische Dienstleistungen für Bibliotheken und digiS für Museen und Archive anbieten will.

GRACE steht für eine verteilte, generalisierte Cloudanwendung für die Wissenschaft, an der sich die Bibliotheken und Bibliotheksverbände wie der KOBV zusammen mit Hochschulrechenzentren beteiligen wollen. Ziel ist es, ein Angebot für verteilt arbeitende Forschergruppen zu schaffen, in der sich eine gemeinsame Arbeitsumgebung aus einzelnen Bausteinen individuell zusammenstellen lässt. Speicherkapazitäten, aber auch Wikis, Webseiten, Mailinglisten und Literaturverwaltungsprogramme zum kollaborativen Arbeiten sollen einfach verfügbar sein und dediziert für die Wissenschaft betrieben werden.

Entsprechende Förderanträge für eine Anschubfinanzierung sind im Oktober 2012 bei der DFG eingereicht worden. Eine Entscheidung wird im März 2013 erwartet.

digiS – SPARTENÜBERGREIFENDE BERATUNGSSTELLE FÜR DIGITALISIERUNGSPROJEKTE

Bearbeitet von: Anne Bauknecht (seit 09/2012), Ralph Böhmert (seit 10/2012), Thorsten Koch, Marko Klindt (seit 10/2012), Anja Müller (seit 09/2012), Beate Rusch

Förderung: Senatskanzlei – Kulturelle Angelegenheiten Berlin

Weitere Informationen unter: <http://www.servicestelle-digitalisierung.de>

2012 hat das Land Berlin ein Förderprogramm zur Unterstützung von Berliner Kulturinstitutionen bei der Digitalisierung ihrer Sammlungen initiiert. Parallel dazu wurde die Servicestelle Digitalisierung am ZIB eingerichtet. digiS hat die Aufgabe, die am Förderprogramm beteiligten Einrichtungen bei der Digitalisierung ihrer Kulturgüter, deren Präsentation und der Sicherung der Langzeitverfügbarkeit zu beraten. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt in den Bereichen Wissenstransfer und IT-Dienstleistung.

Ziel des Förderprogramms ist es, die öffentliche Sichtbarkeit des kulturellen Erbes Berlins auch im Hinblick auf die Deutsche Digitale Bibliothek zu erhöhen sowie für die Sicherung der Langzeitverfügbarkeit der digitalen Objekte Sorge zu tragen. Ein eigenes Förderprogramm des Landes begründet sich aus dem derzeitigen Mangel an (nationalen) Fördermöglichkeiten, insbesondere für kleinere Einrichtungen mit interessanten Beständen zur Stadtgeschichte und Kultur sowie dem stetig steigenden Anspruch der Öffentlichkeit, Kulturgüter auch im Internet finden zu wollen. Das Land Berlin ist mit der Gründung der Servicestelle ein bundesweiter Vorreiter für eine spartenübergreifende und landesweit zentrale Koordination von Digitalisierungsprojekten. digiS kooperiert auf regionaler Ebene mit der Koordinierungsstelle Brandenburg-digital und bundesweit auch mit der Deutschen Digitalen Bibliothek.

Im Rahmen der 2012 geförderten Digitalisierungsprojekte sammelten die Pilotpartner vielfältige Erfahrungen bei der Digitalisierung von sehr unterschiedlichen Medienformen:



Brücke-Museum – Innerhalb des Projekts werden ca. 2.000 Ektachrom-Diapositive digitalisiert und präsentiert.

Bröhan-Museum – Das Projekt umfasst die Digitalisierung und Präsentation von Gemälden, sowie die Präsentation bereits digitalisierter Metall- und Glasobjekte aus der Sammlung des Museums.

Stadtmuseum Berlin – Das Stadtmuseum digitalisiert ca. 1.000 Objekte (Großformate, 3D-Darstellung) mit Berlinbezug sowie in einem zweiten Teilprojekt bisher unveröffentlichtes Material aus der Zille-Sammlung.

Zentral- und Landesbibliothek – Die ZLB digitalisiert historische Berliner Adress- und Telefonbücher, die online präsentiert und mit einer Crowdsourcing Komponente angereichert werden.

Landesarchiv – In zwei Teilprojekten werden der Gebrauchskatalog der Landesbildstelle mit ca. 190.000 Fotos sowie 25.000 Glasplattennegative aus Fotografennachlässen mit Berlinbezug digitalisiert und im Web verfügbar gemacht. Zudem werden 1.300 historische Kartenblätter im Maßstab 1:4000 in einem prototypischen Geoinformationssystem digital präsentiert.



digiS – die Servicestelle Digitalisierung Berlin ist ein Pilotprojekt zur spartenübergreifenden Beratung, Unterstützung und Koordination von Digitalisierungsprojekten von kulturellem Erbe in Berlin. digiS ist seit Oktober 2012 am ZIB in der Abteilung Wissenschaftliche Information angesiedelt.

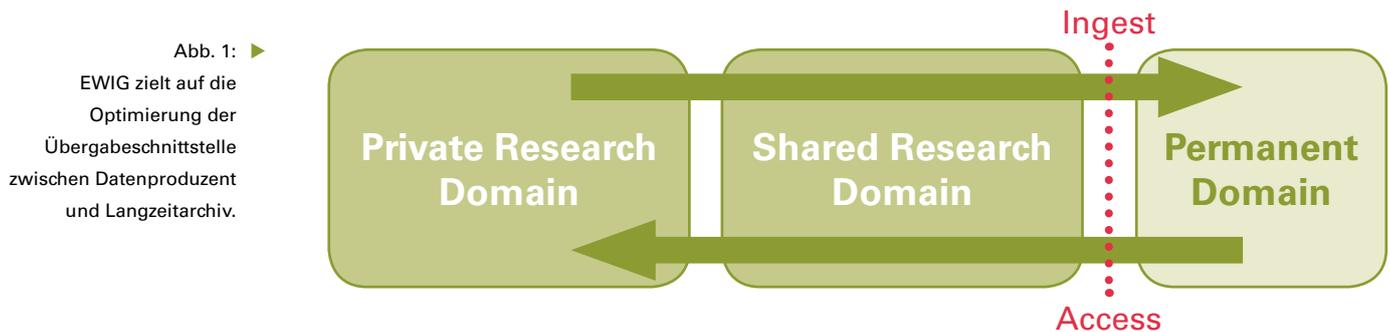
EWIG – LANGZEITARCHIVIERUNG VON FORSCHUNGS-DATEN IN DEN GEOWISSENSCHAFTEN

Bearbeitet von: Tim Hasler (seit 05/2012), Thorsten Koch, Gabriel Müller (bis 08/2012), Wolfgang Peters-Kottig, Beate Rusch, Jens Schwidder (bis 03/2012)

Kooperation: Helmholtz-Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungsZentrum, Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

Weitere Informationen unter: <http://ewig.gfz-potsdam.de>



Das Projekt EWIG ist auf die Unterstützung der Übertragung von Forschungsdaten aus unterschiedlichen Forschungsumgebungen in digitale Langzeitarchive ausgerichtet. Der Fokus der Arbeiten besteht in der Optimierung des Ingestprozesses an der Übergabeschnittstelle zwischen (disziplinspezifischem) Datenproduzent und Langzeitarchiv. Das Projektkonsortium besteht neben dem KOBV im ZIB aus zwei geowissenschaftlichen Institutionen: dem GeoForschungsZentrum Potsdam (GFZ) und dem Institut für Meteorologie der Freien Universität Berlin. In den Geowissenschaften sind die Workflows und Infrastrukturen zum Forschungsdatenmanagement bereits vergleichsweise weit entwickelt – dennoch gibt es Lücken im Datenfluss zwischen den unterschiedlichen Stationen im „Digital Curation Continuum“:

Die erste Projektphase diente zur Identifizierung von vorhandenen Lücken und Vernetzung mit vergleichbaren Projekten in Deutschland durch insgesamt 20 Expertengespräche mit Infrastruktureinrichtungen und Datenzentren. In der zweiten Phase wird am ZIB das Problem der technischen Qualitätssicherung von Forschungsdaten bearbeitet. Hier setzt das Kon-

zept eines „Werkzeugkastens“ an, der diverse Softwarebausteine zur Prüfung der Integrität und Authentizität gelieferter Datenobjekte verfügbar macht. Da der Ingestprozess von Forschungsdaten in ein Langzeitarchiv den größten Anteil an den Kosten der langfristigen Archivierung ausmacht, kommt der Prüfung von Inkonsistenzen und Fehlern hier besondere Bedeutung zu.

Bei den Projektpartnern werden in der zweiten Projektphase institutionelle Policies zum Forschungsdatenmanagement entwickelt, die als Mustervorlage für verschiedene geowissenschaftliche Institutionen dienen können. Policies regeln die organisatorischen Aspekte des Umgangs mit produzierten Daten.

Außerdem werden in EWIG Konzepte für Lehr- und Weiterbildungsveranstaltungen entworfen und in der universitären Ausbildung erprobt, um das Thema Forschungsdatenmanagement stärker in der Fachwissenschaft zu etablieren. Im Wintersemester 2012/2013 startete dieser Projektteil mit dem Modul „Datenmanagement“ in der Bachelor-Ausbildung des Instituts für Meteorologie.

PROJEKTE DER ABTEILUNG WISSENSCHAFTLICHE INFORMATION

Alle Projekte im Netz ausführlich unter: <http://www.zib.de/de/si.html>

ISMP 2012

URL: <http://www.ismp2012.org>

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

Inhalt: Der Webaufttritt für das International Symposium on Mathematical Programming (ISMP), Veranstaltungsort war die TU Berlin.

Computeralgebra (REDUCE)

URL: <http://www.reduce-algebra.com>

Mitarbeiter: Winfried Neun

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

Museumsprojekt

URL: <http://www.zib.de/de/si/museumssoftware.html>

Mitarbeiter: Harald Eggers, Barbara Fichtl, Beate Jahn, Carlos 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

Mitarbeiter: Susanne Gottwald, Thoralf Klein, Thorsten Koch, Gunar 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

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

Mitarbeiter: Susanne Gottwald, Thoralf Klein, Thorsten Koch, Gunar Maiwald, Beate Rusch, Jens Schwidder, Eduard Simon, Sascha Szott, Doreen Thiede

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: Tim Hasler, Simon Putzke, Wolfgang Dalitz

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

MPC – elektronisches Journal ‚Mathematical Programming Computation‘ (MPC)

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

Mitarbeiter: Thorsten Koch, Wolfgang Dalitz

Inhalt: Das Journal MPC bietet einen vollständigen elektronischen Workflow (Einreichung, Review, Revision und Veröffentlichung).

Fachgruppe IuK der DMV/ÖMG

URL: <http://www.zib.de/IuK-DMV>

Mitarbeiter: Uwe Pöhle, Wolfgang 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: <http://www.math-net.org>

Mitarbeiter: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel

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

PROJEKTE DES KOBV

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

Automatische Fehleranalyse in Bibliothekskatalogen (Mable+)

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte

Mitarbeiter: Julia Goltz, Jens Schwidder
Partner: Bibliotheksverbund Bayern (BVB)
Inhalt: Konzeption und prototypische Entwicklung eines Baukastensystems für die automatisierte Analyse und Bearbeitung von bibliographischen Metadaten.

Contentvisualisierung für Bibliothekskataloge

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte

Partner: Bibliotheksverbund Bayern (BVB)
Mitarbeiter: Julia Goltz, Jens Schwidder
Inhalt: Konzeptstudie zum Einsatz von Visualisierungsmöglichkeiten z. B. der Regensburger Verbundklassifikation in Bibliothekskatalogen.

EWIG – Entwicklung von Workflowkomponenten für die Langzeitarchivierung von Forschungsdaten in den Geowissenschaften

URL: <http://ewig.gfz-potsdam.de>

Mitarbeiter: Tim Hasler, Wolfgang Peters-Kottig
Partner: Helmholtz-Zentrum Deutsches GeoForschungszentrum Potsdam, Institut für Meteorologie der FU Berlin
Inhalt: Optimierung der Workflows zur Übergabe von Forschungsdaten an digitale Langzeitarchive.

Gemeinsame Normdatei für Aleph

URL: www.kobv.de/ueber_den_kobv/fe_projekte

Mitarbeiter: Beate Rusch
Partner: Hochschulbibliothekszentrum NRW, Bibliotheksverbund Bayern, Österreichischer Bibliothekenverbund und Service GmbH, Ex Libris GmbH
Inhalt: Konzeption und Implementierung der Software zur Unterstützung der neuen nationalen Normdatei für Personen, Körperschaften und Sachschlagwörter in den ALEPH-Katalogisierungsdatenbanken (abgeschlossen in I Q 2012).

DIENSTLEISTUNGEN FÜR BENUTZER AUS BILDUNG UND WISSENSCHAFT

KOBV-Bibliothekenführer

<http://bibinfo.kobv.de/>

KOBV-Portal mit Online-Fernleihe

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

Virtueller Verbundkatalog (Film, Judaica, Noten)

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

DIENSTLEISTUNGEN FÜR BIBLIOTHEKEN

Automatisierte Fernleihe

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

ASP-Dienst ALBERT – Library Search Engine

<http://albert.kobv.de/>

ASP-Dienst OPUS- und Archivierungsdienste

www.kobv.de/bib_opus_archivierung.html

ASP-Dienst Portale und SFX

www.kobv.de/bib_konsortial.html

ASP-Dienst Primo

www.kobv.de/bib_primo.html

ASP-Dienst Verde

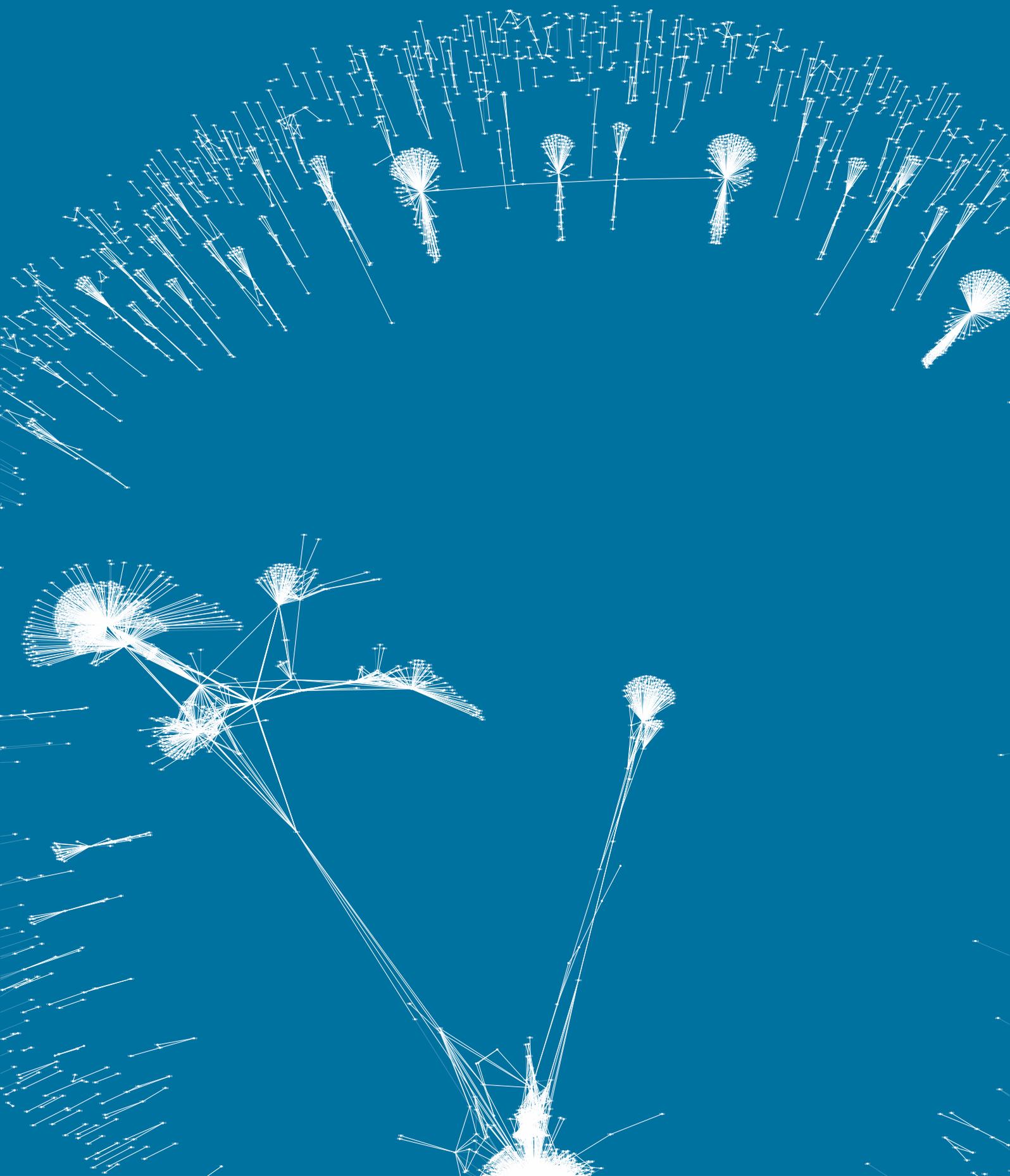
www.kobv.de/bib_verde.html

Hosting für lokale Applikationen

www.kobv.de/bib_hosting_software.html

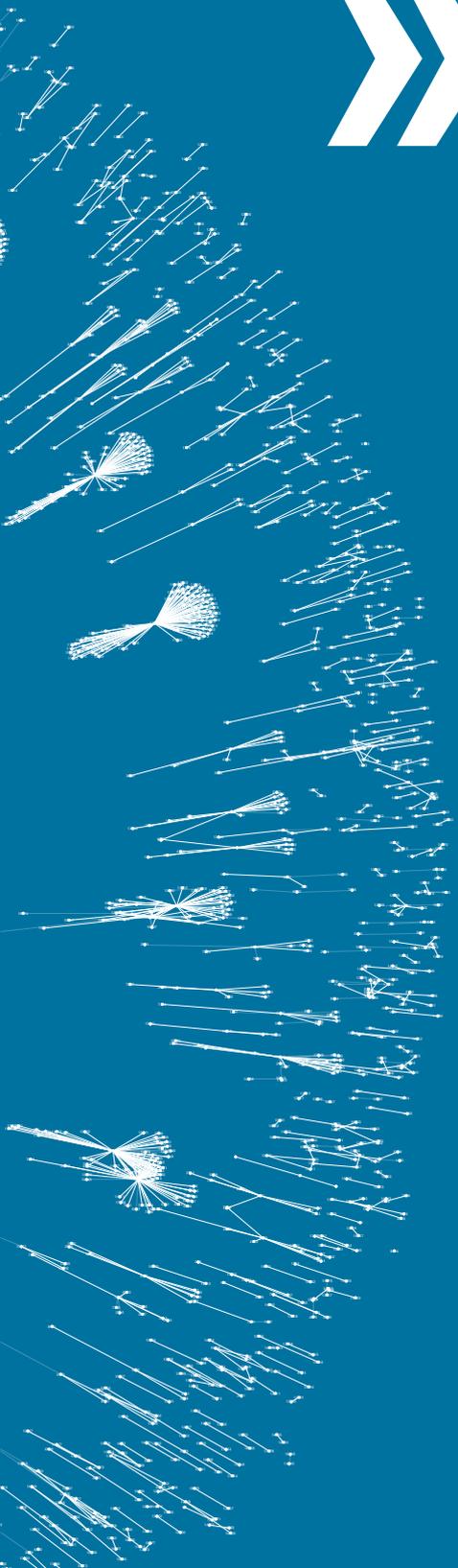
KOBV-Index

www.kobv.de/kobvindex.html





PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME



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 für komplexe Berechnungen eingesetzt. Unsere langjährige Erfahrung in der Entwicklung hochparalleler Algorithmen trifft daher auf großes Interesse in Wissenschaft und Wirtschaft.

Cloud-Computing, Web-Services und Peer-to-Peer-Protokolle haben aus dem Internet eine interaktive Plattform mit vielfältigen Dienstleistungen und großer wirtschaftlicher Bedeutung gemacht. Unsere Forschung dient dem besseren Verständnis und der Erweiterung der theoretischen Grundlagen. Mit praktischen Implementationen fehlertoleranter, adaptiver Softwaresysteme im Internet validieren wir unsere Ergebnisse. Forschungsschwerpunkte sind verteilte Dateisysteme, skalierbare Internet-Dienste und die effiziente Nutzung von heterogenen Systemen.

STRUKTUR

Die Abteilung besteht aus drei Arbeitsgruppen:

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

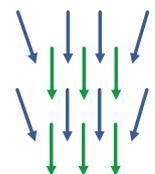
VERTEILTES DATENMANAGEMENT

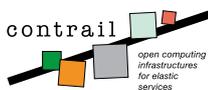
Diese Arbeitsgruppe entwickelt Methoden zur Verwaltung global verteilter Daten. Replikation und Synchronisation, Konsistenz und Fehler-toleranz spannen die zentralen Problemfelder unserer Forschung in diesem Gebiet auf.

Das Cloud-Dateisystem **XtreemFS** ist eines unserer Schlüsselprojekte. Mit über zwanzig Personenjahren Entwicklungszeit hat die **XtreemFS**-Software nun nahezu die Qualität einer Produktionssoftware erreicht und wird daher auch bereits im täglichen Betrieb als leistungsfähiges Dateisystem eingesetzt, beispielsweise auf Servern für den schnellen Zugriff auf Filmsequenzen, als Dateisystem von Cluster-Systemen und zur Dateiverwaltung von Chemiedaten im Projekt MoSGrid.

Mit seinem objektorientierten Ansatz verwaltet **XtreemFS** die Metadaten separat von den Objektdaten, was zusammen mit dem Daten-Striping einen schnellen Datenzugriff im Internet ermöglicht. Die Entwicklung der Software wird zum größten Teil von der Europäischen Union mit dem Projekt CONTRAIL (2010-13) sowie den angelaufenen Projekten HARNESS und IES-Cities finanziell gefördert. Aufbauend auf **XtreemFS** sind auch im Jahr 2012 wieder zwei Dissertationen abgeschlossen worden, diesmal zu den Themen ausfallsichere Lease-Protokolle und verteilte Snapshots.

Scalaris ist unser zweites, international bekanntes Schlüsselprojekt. Bei seiner Entwicklung war **Scalaris** der weltweit erste verteilte Key/Value-Speicher, der Transaktionen auf replizierten Daten in einem strukturierten Overlay-Netzwerk realisiert. Mittlerweile haben einige Cloud-Provider (insbes. Amazon) nachgezogen und bieten nun für ihre Kunden





neben der schwachen Datenkonsistenz auch Protokolle für strenge Datenkonsistenz an. Diese ist bei bestimmten Transaktionen (z. B. beim Abschluss eines Kaufvertrages) zwingend notwendig, während die weniger aufwendige schwache Datenkonsistenz beispielsweise bei der Auswahl von Waren und der Zusammenstellung des virtuellen Warenkorbes ausreicht.

SKALIERBARE ALGORITHMEN

In dieser AG konzentriert sich unsere 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.

Im Jahr 2012 haben wir unsere hochparallelen Algorithmen zur Berechnung kürzester Pfade auf Graphen verbessert und können damit nun wesentlich schwerere Probleme lösen. Mit dem MapReduce-Programmiermodell haben wir sehr leistungsfähige Heuristiken, sogenannte Pattern Datenbanken (PDBs), berechnet, die um zwei bis drei Größenordnungen umfangreicher sind als die bislang in der Literatur be-

kannten PDBs. Mit ihrer Hilfe lassen sich nun in wenigen Minuten kostenoptimale Pfade in implizit definierten Graphen berechnen.

HARDWARENAHE ALGORITHMEN

In den letzten Jahren sind die Energiekosten überproportional angestiegen und bilden nun – neben den Investitionskosten – den wichtigsten Kostenfaktor beim Betrieb von Hochleistungsrechnern.

Als stromsparende und leistungsstarke Alternative bieten sich Grafikprozessoren (GPUs) und Field Programmable Gate Arrays (FPGAs) an. Ihre Programmierung ist allerdings aufwendig 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 molekularer Systeme. Als Mitbegründer des OpenFPGA-Konsortiums und der OpenAccelerator-Initiative treiben wir die Entwicklung einheitlicher Programmierstandards voran.

In dem im Jahr 2012 neu angelaufenen EU-Projekt HARNESS suchen wir nach Methoden zur effizienten Nutzung von FPGAs und Flash-Speicher in Cloud-Systemen und im BMBF-Projekt ENHANCE (siehe Projektbeschreibung) entwickeln wir Modelle zur Laufzeitvorhersage industrieller Anwendungen auf GPUs. Die Anwendungsklassen umfassen Fahrzeug-Optimierung, Schadstoffausbreitung, Sequenz-Analyse sowie Wirkstoffentwurf.

GROSSE PATTERN DATENBANKEN FÜR HEURISTISCHE SUCHVERFAHREN

Bearbeitet von: Robert Döbbelin, Thorsten Schütt, Alexander Reinefeld

Weitere Informationen unter: www.zib.de/PVS

Die Kürzeste-Wege-Suche gehört zu den Basisalgorithmen auf Graphen. Viele Anwendungen der kombinatorischen Optimierung, Softwareverifikation, Bioinformatik oder des maschinellen Lernens lassen sich darauf abbilden. Die Zahl der zu betrachtenden Zustände kann mit Hilfe einer Heuristik stark reduziert werden. Eine Heuristik ist eine exakte Lösung für ein vereinfachtes Problem und somit eine Abschätzung für die Kosten des ursprünglichen Problems. Werden diese Kosten nie überschätzt, führt die Heuristik zu einer optimalen Lösung.

PATTERN DATENBANKEN

Eine Art, das Problem zu vereinfachen, sind so genannte Pattern. Ein Pattern umfasst eine Teilmenge der Zustandsvariablen des Originalproblems. Abb. 1 zeigt ein Beispiel eines Patterns für das 3x3-Schiebepuzzle. Hier ist eine Patternkonfiguration über die Positionen der Teilchen 1, 4 und 7 definiert. Die unbeschrifteten Teilchen sind vorhanden, aber nicht unterscheidbar. Der Zustandsraum, der durch dieses Pattern aufgespannt wird, ist wesentlich kleiner als der Zustandsraum des 3x3-Puzzles und somit leichter zu berechnen. Eine Pattern Datenbank (PDB) speichert in einem Hauptspeicherarray für jede Patternkonfiguration deren Entfernung zur Konfiguration der Lösung und liefert somit eine Heuristik für das Originalproblem. Die Distanzen werden in einer Breitensuche ermittelt. Mehrere PDBs können kombiniert werden, indem das Maximum über die Heuristikwerte ermittelt wird. Unter bestimmten Voraussetzungen können die Heuristikwerte mehrerer disjunkter Pattern addiert werden (sog. additive PDBs). Die Größe einer PDB wächst mit der Zahl der betrachteten Variablen, gleichzeitig erhöht sich die Leistungsfähigkeit der Heuristik.

GROSSE PDBS ERSTELLEN

Das Erstellen sehr großer PDBs wird durch die zwei Faktoren Zeit und Raum begrenzt. Neben der eigentlichen Pattern Datenbank müssen für die Breitensuche eine Open- und eine Closed-Liste gespeichert werden. Wir haben einen speicherplatzeffizienten parallelen Algorithmus entwickelt, um PDBs zu erstellen. Durch den Einsatz des gesamten aggregierten Hauptspeichers und der vereinten Rechenleistung mehrerer paralleler Rechner sind wir erstmals in der Lage, sehr große PDBs zu erzeugen. Für die Breitensuche wird eine bijektive Hashfunktion eingesetzt, die jeder Patternkonfiguration einen Index in das Array zuordnet. Neben der Tiefe speichern wir für jede Patternkonfiguration eine Open- und eine Closed-Liste für die Positionen des Freifelds. Die Breitensuche wird iterativ ausgeführt, wobei das Hauptspeicherarray auf alle parallelen Prozessoren aufgeteilt wird. Jeder Prozessor scannt in jeder Iteration seinen Teil des Array und berechnet die Nachfolger aller Zustände der aktuellen Tiefe. Die Nachfolger werden lokal gesammelt und in einem Kommunikationsschritt ausgetauscht. Anschließend können die Statusinformationen für die nächste Tiefe aktualisiert werden. Sobald keine Nachfolger mehr erzeugt werden, ist die Breitensuche abgeschlossen.

Im Zuge dieser Arbeit¹ haben wir PDBs für das 5x5 Puzzle erzeugt. Die bisher größte PDB für diese Problemdomäne hat einen Umfang von 486 MB. Sie besteht aus vier additiven PDBs mit jeweils sechs Teilchen (6-6-6-6 PDB). Wir haben eine 8-8-8, eine 9-8-7 und eine 9-9-6 PDB erzeugt mit Speichergrößen von 122 GB, 733 GB bzw. 1381 GB. Hierfür haben wir 256 MPP-Knoten des HLRN-II genutzt. Um die PDBs effizient nutzen zu können, müssen sie bei der Suche in den Hauptspeicher geladen werden.

Abb. 1:
Ein Pattern für das 3x3-Puzzle

▼

	1	
	4	
	7	

Abb. 2:
Lösung des 3x3-Puzzles

▼

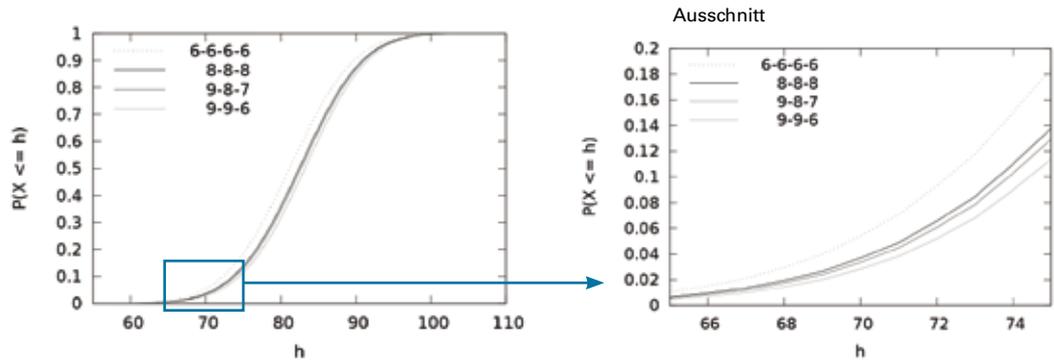
	1	2
3	4	5
6	7	8

¹R. Döbbelin, T. Schütt, A. Reinefeld: **Building Large Compressed PDBs for the Sliding Tile Puzzle**. ZIB Technical Report 2013



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Pattern Datenbanken (PDBs) sind sehr leistungsfähige Heuristiken in Form von vorberechneten Speichertabellen für Kürzeste-Wege-Suchen auf Graphen. Größere PDBs liefern bessere Kostenabschätzungen und erlauben somit eine stärkere Reduktion des Suchraums. Wir haben mit Hilfe eines parallelen Algorithmus PDBs erzeugt, die drei Größenordnungen größer sind als die bislang größte PDB in der gewählten Problemdomäne.

Abb. 3: ▶
Kumulative Verteilung der h-Werte für 100.000.000 Zufallsinstanzen

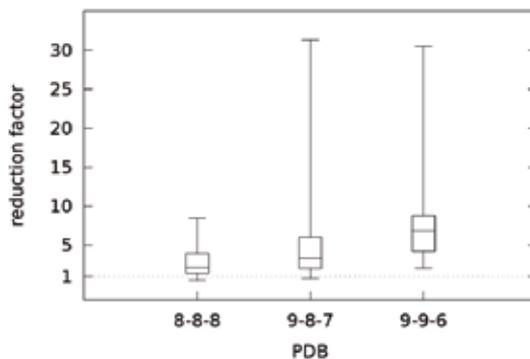


Daher haben wir für die Analyse der Leistungsfähigkeit der erstellten PDBs eine SGI Ultra-Violett des HLRN-II mit 2 TB RAM verwendet. Abb. 3 zeigt das statistische Ergebnis der Leistung mittels Samplings. Dabei wurden 100.000.000 Zufallsinstanzen des 5x5 Puzzles erzeugt und deren Heuristikwert (h-Wert) bestimmt. Die Abbildung zeigt die kumulative Verteilung der h-Werte. Für die heuristische Suche ist insbesondere die Reduktion kleiner h-Werte von Bedeutung. Im Vergleich zur 6-6-6-6 PDB liefern die großen Heuristiken deutlich weniger kleine h-Werte. In einem zweiten

Experiment haben wir 50 Zufallsinstanzen optimal gelöst und die Zahl der expandierten Knoten in Relation zur Knotenexpansion mit der 6-6-6-6 PDB gesetzt. Abb. 4 stellt die erzielte Reduktion dar. Mit Hilfe der 9-9-6 PDB konnte die Zahl der expandierten Knoten im Mittel um den Faktor 7 reduziert werden. Die maximale Reduktion beträgt 31.

Das vorgestellte Verfahren erlaubt es, große PDBs effizient im Hauptspeicher zu erzeugen. Wir haben gezeigt, dass größere PDBs die Zahl der expandierten Knoten deutlich reduzieren können.

Abb. 4: ▶
Reduktion der expandierten Knoten durch die erzeugten PDBs



MODELLIERUNG VON TRANSAKTIONEN IN GRAPHDATENBANKEN

Bearbeitet von: Ulrike Golas

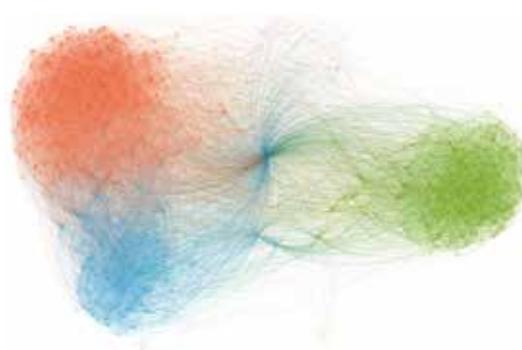
Weitere Informationen unter: www.zib.de/jb2012/gt4gdb

Graphen sind eine beliebte Modellierungstechnik, um verschiedenste Probleme mit Hilfe von Knoten, Kanten und ihren Beziehungen zueinander zu veranschaulichen. Ein typisches Beispiel sind Beziehungsnetzwerke, die Akteure als Knoten und deren Beziehungen als Kanten darstellen (siehe Abb. 1 und 2). Sowohl in Knoten als auch Kanten können Eigenschaften – sogenannte Attribute oder Properties – gespeichert werden, um die Ausdrucksmächtigkeit des Modells zu erhöhen.

GRAPHDATENBANKEN

Für das Speichern von Graphen, insbesondere bei großen Datenmengen mit vielen unterschiedlichen Beziehungen, sowie deren schnelle Auswertung und Analyse sind relationale Datenbanken nicht gut geeignet. Vor allem JOIN-Operationen zur Verknüpfung mehrerer Tabellen – eine der häufigsten Abfrage-Operationen – sind speicher- und rechenintensiv, weil immer wieder große Datenmengen kopiert werden müssen.

Eine Alternative stellen Graphdatenbanken¹ dar, die nicht nur Datenknoten und ihre Eigenschaften, sondern auch deren Beziehungen als Kanten explizit speichern. Über Graphtraversierung, d. h. das Ablaufen eines Graphs entlang seiner Kanten, können lokale Beziehungen schnell und kostengünstig abgefragt werden. Der Hauptvorteil ist, dass ausgehend von einem konkreten Objekt nur dessen direkte Nachbarn betrachtet und nicht der komplette Datenbestand bearbeitet werden müssen, wie dies bei relationalen Datenbanken der Fall ist.



◀ Abb. 1:
Eines der populärsten Beispiele für Beziehungsnetzwerke sind die Graphen sozialer Netzwerke wie Facebook oder LinkedIn, die Millionen von Knoten und Kanten enthalten. (Bildquelle: LinkedIn)

GRAPHTRANSFORMATION

Häufig sollen Graphen nicht nur gespeichert, sondern auch verändert und angepasst werden. Graphtransformation² beschreibt die regelbasierte Veränderung von Graphen. Ein Beispiel für eine Regel ist in Abb. 3 zu sehen – sie beschreibt das Einfügen einer neuen Beziehung „bekannt“ mit der Interpretation, dass eine Person die Freunde ihres Ehepartners kennt. Regeln können automatisch auf einen gespeicherten Graphen angewendet werden, um so z. B. alle „bekannt“-Kanten einzufügen.

Der Graphtransformation liegt eine vielfältige mathematische Theorie zu Grunde, um unterschiedlichste Eigenschaften von Transformationssystemen zu analysieren. Die kategorientheoretische Grundlage der Graphtransformation erlaubt die Behandlung vieler unterschiedlicher Graphtypen und graphähnlicher Strukturen auf Basis sogenannter M-adhäsiver Kategorien. Insbesondere können Regeln bezüglich ihrer Abhängigkeit bzw. Unabhängigkeit voneinander überprüft werden. Durch die Angabe von Constraints und Anwendungsbedingungen können bewiesene Eigenschaften eines Systems über die Anwendung von Regeln hinweg bewahrt werden.

M-adhäsive Kategorien basieren auf einer Klasse M von Abbildungen, die die möglichen Regeln einschränkt. In ihnen gilt die van Kampen-Eigenschaft, die die Kompatibilität von Vereinigungen und Schnitten sicherstellt.

¹S. Edlich, A. Friedland, J. Hampe, B. Brauer, M. Brückner: **NoSQL – Einstieg in die Welt nichtrelationaler Web 2.0 Datenbanken**. Hanser-Verlag, 2011 ²H. Ehrig, K. Ehrig, U. Prange, G. Taentzer: **Fundamentals of Algebraic Graph Transformations**. Springer-Verlag, 2006



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Graphdatenbanken werden immer häufiger zum Speichern von Daten mit vielen unterschiedlichen Beziehungen untereinander verwendet. In diesem Projekt wird Graphtransformation zur Modellierung der Transaktionen in Graphdatenbanken eingesetzt. Damit wird eine mathematisch fundierte Grundlage geschaffen, um Konsistenz- und Modelleigenschaften der gespeicherten Graphen nachweisen zu können.

Abb. 2: Ein typischer Ausschnitt eines Beziehungsnetzwerks, in dem verschiedene Akteure, ihre Beziehungen untereinander und deren verschiedene Attribute dargestellt werden.

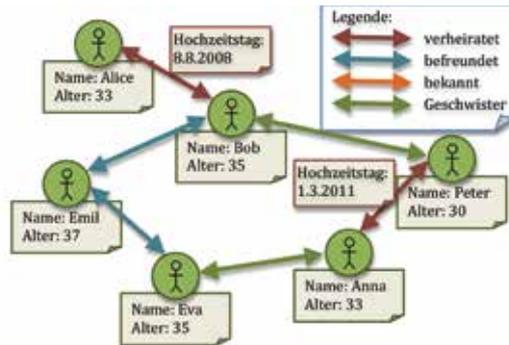
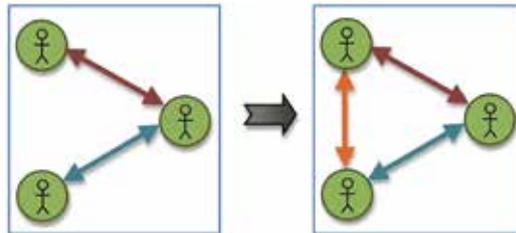


Abb. 3: Eine Graphtransformationsregel, die eine „bekannt“-Kante (orange) zwischen einer Person und einem Freund (blau) des Ehepartners (rot) einfügt.



In einer ω -adhäsiven Kategorie müssen zusätzlich zu den Regeln auch die Matches bestimmte Eigenschaften erfüllen. Dies schränkt zwar die Möglichkeiten des Modellierers etwas ein, garantiert aber, dass nach jeder Regelanwendung wieder ein gültiger Graph entsteht.

TRANSAKTIONEN IN GRAPHDATENBANKEN

In Datenbanken werden Veränderungen transaktionsbasiert durchgeführt. Eine Transaktion besteht aus mehreren Teiloperationen, von denen entweder alle oder keine angewendet werden sollen, um ein konsistentes System sicher zu stellen. In relationalen Datenbanken sollen typischerweise die Eigenschaften Atomarität, Konsistenzerhaltung, Isolation und Dauerhaftigkeit (ACID) sicher gestellt werden. Im Gegensatz dazu werden diese in Graphdatenbanken nicht notwendigerweise gefordert. Abhängig vom Datenmodell und dem Einsatzgebiet können auch weniger strikte Konsistenzmodelle wie BASE³ zum Einsatz kommen. Dieses beschreibt den Verzicht auf strikte Konsistenz im Tausch gegen bessere Verfügbarkeit und schnellere Antwortzeiten.

Während Transaktionen in relationalen Datenbanken sehr gut untersucht sind und verschiedene Mechanismen und Optimierungen implementiert wurden, fehlt ein entsprechend fundiertes und mathematisch unterlegtes Modell für Graphdatenbanken. Hier bietet sich die Graphtransformation als Grundlage an. Die M-adhäsiven Kategorien können zu ω -adhäsiven Kategorien erweitert werden, in denen fast die gleichen Eigenschaften gelten.⁴ Die Property-Graph-Datenmodelle, die den meisten Graphdatenbanken zugrunde liegen, sind eine Instanz dieser ω -adhäsiven Kategorien. Als Ergebnis können diese Graphen mit Graphtransformation verändert und die Transformationen analysiert werden.

AUSBLICK

Im weiteren Projekt sollen Transaktionen in Datenbanken durch Transformationen modelliert werden, um ein beweisbares Verhalten sicherzustellen. Die einzelnen Teiloperationen einer Transaktion sollen über Graphregeln modelliert werden, die entsprechend zusammengefasst und gruppiert werden können. Die Analysemöglichkeiten der Graphtransformation insbesondere im Hinblick auf Abhängigkeit und Unabhängigkeit von Regelanwendungen sollen dazu genutzt werden, Strategien für die Nebenläufigkeitskontrolle zu entwickeln. Abhängig vom Einsatzgebiet sollen Regelmengen für verschiedene Konsistenzmodelle definiert werden, deren Anwendung in der Graphdatenbank die entsprechenden Eigenschaften sicherstellt. Damit ist – abhängig von den gewählten Regeln – sowohl das strikere ACID- als auch das weniger strikte BASE-Modell für Graphdatenbanken anwendbar.

³ W. Vogels: Eventually Consistent. ACM Queue Vol. 6, Nr. 6, 2008 ⁴U. Golas: A General Attribution Concept for Models in M-Adhesive Transformation Systems. In: H. Ehrig, G. Engels, H.-J. Kreowski, and G. Rozenberg, Ed., Graph Transformations. Proc. ICGT 2012, LNCS Vol. 7562, S. 187-202. Springer, 2012

MOSGRID: MOLECULAR SIMULATION GRID

Bearbeitet von: Patrick Schäfer, Thomas Steinke

Weitere Informationen unter: <http://www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/mosgrid.html>



Molekülsimulationen bieten neue Erkenntnisse zur Struktur von Molekülen und deren Funktion. Es existieren eine Vielzahl von Simulationscodes, die Forscher bei der Verarbeitung großer Datenmengen im Bereich der Quantenchemie, Molekulardynamik und Docking unterstützen. Das Ziel von MoSGrid liegt in der Entwicklung eines Portals, der Infrastruktur zur Langzeit-Archivierung und der Ausführung von Simulationen im Kontext des D-Grids (Abb. 1).

DIE MOSGRID INFRASTRUKTUR

Über das MoSGrid Portal^{1,2} wird Forschern ein einfacher Zugang zu seinen Daten, Simulationscodes und den Rechenressourcen im D-Grid geboten. MoSGrid wurde basierend auf den Softwarekomponenten WS-PGRADE, dem Workflow-Manager und -Monitor gUSE, der Grid-Middleware UNICORE und dem verteilten Dateisystem **XtreemFS** entwickelt (Abb. 2). Diese Komponenten werden verbunden über eine Sicherheitsinfrastruktur bestehend aus X.509 Zertifikaten und SAML-Assertions.

WS-PGRADE und gUSE ermöglichen die Verwaltung von chemischen Simulationen in Form von Workflows. Ein Workflow setzt sich zusammen aus mehreren Jobs (Simulationsschritten). Ein Job setzt sich zusammen aus einem Rezept (dem zu verwendenden Simulationscode) und den benötigten Eingabeparametern sowie der

zu erwartenden Ausgabeparameter im Erfolgsfall. Dieser Workflow wird an UNICORE übergeben, und damit der Job auf dem Grid ausgeführt. Zwischen- sowie Ergebnisdaten werden abschließend zurück an das Portal geliefert. Aus den Ergebnisdaten werden Metadaten extrahiert, die für nachfolgende Suchschritte aufbereitet und über das Portal präsentiert werden.

In MoSGrid werden eine Vielzahl an Simulationscodes (Gromacs, Gaussian, Turbomole, etc.), Strukturformaten von Molekülen (CML, PDB, SDF) und Anwendungsdomänen (Moleküldynamik, Docking, Quantenchemie) unterstützt.

Für die Verwaltung abstrakter Simulationsvorschriften (Rezepte) wurde in MoSGrid das MSML-Format (Molecular Simulation Markup Language) entwickelt, das auf der Chemical Markup Language (CML) aufbaut. Die MSML erlaubt es, eine programmneutrale Beschreibung einer Simulation zu erstellen, die vor Ausführung der Simulation um konkrete Eingabedaten für einen Simulationscode und ein zu simulierendes System erweitert werden muss. Im Laufe der Simulation wird die MSML um Zwischenergebnisse, Ergebnisdaten sowie Metadaten erweitert.

MOSGRID DATENMANAGEMENT

Unsere Hauptaufgabe in MoSGrid liegt im Datenmanagement, das die persistente Speicherung von Simulationsdaten, der Erfassung von Metadaten und Verwaltung von Rezepten beinhaltet.

Die in MoSGrid entwickelte MSML stellt die zentrale Informationsanlaufstelle dar, aus der über eine Reihe von Konvertierungs- und Analyseschritten konkrete Eingabedaten für jeden nachfolgenden Simulations- oder Analyseschritt generiert werden. Die Übersetzung der MSML

◀ Abb. 1:
Das MoSGrid Portal

XtreemFS ist ein am ZIB entwickeltes, verteiltes Dateisystem in dem Metadaten und die Rohdaten einer Datei auf unterschiedlichen Servern gespeichert werden. Diese Trennung von Metadaten und Rohdaten erhöht die Skalierbarkeit. Zugriff auf XtreemFS wird u. a. über eine Client-Komponente angeboten, die POSIX-konforme Dateisystem-Aufrufe in RPC-Aufrufe an die korrespondierenden Dienste übersetzt. **XtreemFS** wurde im Rahmen von MoSGrid in WS-PGRADE, gUSE, UNICORE und die D-Grid Sicherheitsinfrastruktur integriert und an den Standorten der Projektpartner in Berlin, Dresden, Köln, Tübingen und Paderborn installiert.

¹ Gesing, Herres-Pawlis, Birkenheuer, Brinkmann, Grunzke, Kacsuk, Kohlbacher, Kozlovsky, Krüger, Müller-Pfefferkorn, Schäfer, Steinke: **A Science Gateway Getting Ready for Serving the International Molecular Simulation Community**. Proceedings of Science, 2012 ² Gesing, Grunzke, Krüger, Birkenheuer, Wewior, Schäfer, Schuller, Schuster, Herres-Pawlis, Breuers, Balasko, Kozlovsky, Szikszay Fabri, Packschies, Kacsuk, Blunk, Steinke, Brinkmann, Fels, Müller-Pfefferkorn, Jäkel, Kohlbacher: **A Single Sign-On Infrastructure for Science Gateways on a Use Case for Structural Bioinformatics**. Journal of Grid Computing, 2012



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das Ziel von MoSGrid liegt in der Entwicklung einer Infrastruktur zur Ausführung von Simulationscodes in den Bereichen Quantenchemie, Molekulardynamik und Docking auf der D-Grid-Infrastruktur.

Abb. 2: ▶

Die MoSGrid Softwarearchitektur bestehend aus den Softwarekomponenten gUSE, WS-PGRADE, UNICORE, XtremFS und dem D-Grid

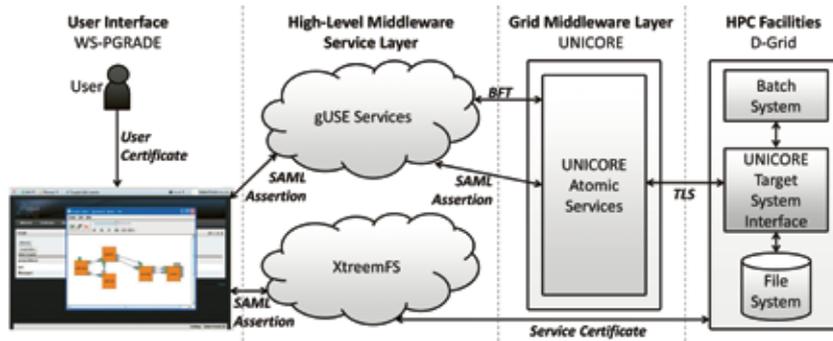
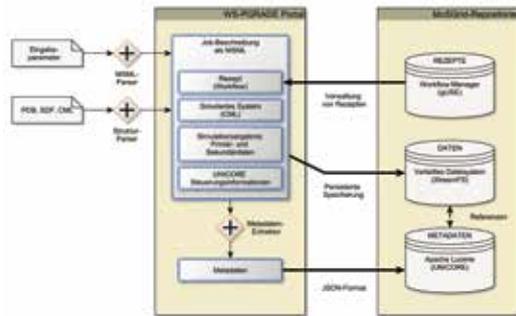


Abb. 3: ▶

Das Datenmanagement in MoSGrid



- Die aus der MSML extrahierten Metadaten werden über den UNICORE Metadata Service, der auf Apache Lucene aufbaut, für nachfolgende Analyseschritte bereitgestellt.

Am Anfang einer Simulation werden die Eingabedaten in Form der MSML in **XtremFS** gespeichert. Am Ende einer Simulation werden die Ergebnisse in Form der MSML aus dem D-Grid zurück nach **XtremFS** gespeichert. Dies erfolgt transparent, ohne Interaktion des Anwenders durch UNICORE und gUSE.

AUSBLICK

XtremFS wurde transparent in den MoSGrid Softwarestack zur Speicherung von Simulationsdaten integriert. Die **XtremFS** Installation in MoSGrid umfasst 96TiByte an Speicherplatz. Am Ende des Förderzeitraums von MoSGrid setzte sich die Community aus etwa 120 Anwendern vieler Anwendungsgebiete der Chemie und Bioinformatik in Deutschland zusammen. In Form EU-geförderter Folgeprojekte existieren Bestrebungen diese Aktivitäten auf Forschungsgruppen außerhalb Deutschlands zu erweitern.

gUSE ist ein Web-Service zur Verwaltung und dem Monitoring von Workflows in Grid-sowie Cloud-Infrastrukturen. WS-PGRADE ist ein web-basiertes Interface für gUSE basierend auf Liferay.

in die konkreten Eingabedaten für die Simulationscodes wird über Parser und Extraktoren realisiert. Ergebnisdaten werden über Adapter zurück in die MSML geschrieben.

Dabei stand die Integration der Softwarekomponenten in den MoSGrid-Software-Stack im Vordergrund (Abb. 3):

- WS-PGRADE bietet einen vereinheitlichten Zugang zu gUSE, **XtremFS** und den Metadaten.
- gUSE wird zur Verwaltung von Rezepten in Form von Workflows und Übergabe der Jobs an das darunterliegende D-Grid eingesetzt.
- **XtremFS** speichert Zwischenergebnisse, Moleküldaten und Ergebnisse chemischer Simulationen in Form der MSML sicher, persistent und redundant.

UNICORE ist eine Grid-Middleware, die einen einfachen und sicheren Zugriff auf eine Grid-Infrastruktur bietet. Zusätzliche von UNICORE in MoSGrid genutzte Funktionen sind das Daten- und Metadaten-Management.

PROJEKT ENHANCE: HETEROGENE RECHNER EINFACHER ERSCHLIESSEN

Bearbeitet von: Sebastian Dreßler, Igor Merkulow, Thomas Steinke, Florian Wende

Förderung: BMBF

Weitere Informationen unter: <http://www.enhance-project.de>



◀ Die Abbildung zeigt die Visualisierung von Laufzeitdaten mit der in ENHANCE entwickelten Web-Applikation „EPerF Analyzer“. Mehrere Laufzeitexperimente, hier in unterschiedlicher Farben zwei Messungen der Anwendung Otree auf CPUs und GPU, können in übersichtlicher Weise analysiert werden.

Heterogene Rechnersysteme sind jüngst von besonderem Interesse, da sie neben Standardprozessoren spezialisierte Many-Core-Prozessoren wie Graphic Processing Units (GPU) oder Field Programmable Gate Arrays (FPGA) integrieren. Diese Many-Core-Prozessoren bieten Leistungssteigerungen bei minimiertem Energieverbrauch, da deren Architektur für bestimmte Anwendungsbereiche besonders optimiert ist.

Die Nutzung heterogener Systeme ist momentan durch einige Herausforderungen und Einschränkungen bezüglich Produktivität bei der programmtechnischen Umsetzung, der Systemintegration und dem Ressourcenmanagement gekennzeichnet. Das Projekt ENHANCE (enabling heterogeneous hardware acceleration using novel programming and scheduling models) adressiert diese Probleme, um den

Einsatz heterogener Systeme zu vereinfachen. Gemeinsam mit Projektpartnern aus dem industriellen und akademischen Umfeld werden neue Verfahren entwickelt, die die Migration von Anwendungen auf heterogene Plattformen und die Verwaltung der heterogenen Rechenressourcen vereinfachen. Anhand von Anwendungen mit industrieller Relevanz wie der Fahrzeug-Optimierung, der Schadstoffausbreitung, der Next-Generation-Sequencing-Analyse oder dem Wirkstoffentwurf wird die Eignung der entwickelten Werkzeuge validiert.

Am ZIB werden einerseits Fragen bezüglich der Modellierung und Vorhersage des Laufzeitverhaltens sowie Verfahren zur Abstraktion von Hardware bearbeitet. Diese Themengebiete stellen wichtige Bindeglieder zwischen Anwendungsentwicklung und Ressourcenmanagement dar. Des Weiteren werden am ZIB durch



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Zunehmend sind heterogene Rechnersysteme im Einsatz, in denen Standardprozessoren um dedizierte, spezialisierte Many-Core-Prozessoren wie Graphic Processing Units (GPU) ergänzt werden. Sie bieten eine Leistungssteigerung bei gleichzeitiger Reduzierung der Energieaufnahme. Die Migration von Anwendungen und deren Nutzung auf heterogenen Systemen ist jedoch mit zusätzlichen Herausforderungen verbunden, die im BMBF-Projekt ENHANCE adressiert werden. Die Entwicklung dieser Ansätze wird anhand von Anwendungen aus dem industriellen und dem akademischen Umfeld validiert.

Grafikkarten (Graphic Processing Units, GPUs) und Many-Core-Prozessoren sind gängige Komponenten in heterogenen Rechnersystemen.

Der Einsatzzweck von GPUs hat sich in den letzten Jahren von der reinen Visualisierung hin zur hochparallelen Verarbeitung von Daten gewandelt. Mit dem Intel Xeon Phi ist jüngst ein weitere Many-Core-Prozessorarchitektur verfügbar, der speziell für numerisch aufwendige Berechnungen konzipiert ist.

Als weitere heterogene Prozessorarchitektur sind für spezielle Anwendungsbereiche Field Programmable Gate Arrays (FPGA) im Einsatz, die eine direkte Umsetzung von Algorithmen in Hardware ermöglichen.

Implementierungen die Many-Core-Prozessorarchitekturen (NVIDIA GPU, Convey HC-1, Intel Xeon Phi) detailliert untersucht.

Die Modellierung des Laufzeitverhaltens von Anwendungen unterstützt den Entwickler vorab bei der Kosten-Nutzen-Analyse einer geplanten Migration auf eine heterogene Plattform. Zusätzlich dienen Vorhersagen der Laufzeit auf den unterschiedlichen Rechenressourcen dem Ressourcenmanagement (Scheduling). Zur Modellierung der Laufzeit wurde am ZIB ein Modell erarbeitet, das auf der statischen Analyse des Programmquelltextes basiert und das Laufzeitverhalten vorhersagt. Die Neuerung unseres Herangehens besteht in der Verwendung des offenen LLVM-Compilers, welcher den originalen Quelltext in eine intermediäre Darstellung überführt. Damit wird die übliche funktionelle Abhängigkeit von einer Hochsprache aufgelöst und eine generische Modellierung möglich. Für die Beschreibung der Zielplattform der Modellierung wurde ein abstraktes Plattformmodell definiert, mit dem heute existierende und künftige Plattformen abgebildet werden können.

Für die Modellvalidierung und das Ressourcenmanagement zur Ausführungszeit ist die Erfassung von Laufzeiten in komplexen Anwendungsszenarien notwendig. Dazu wurde am ZIB das ENHANCE Performance Frameworks (EPerF¹) entwickelt, mit dem in einfacher Weise der Entwickler in Laufzeitexperimenten präzise und plattformneutral definierte Teile seiner Anwendung zeitlich vermessen kann. In Ergänzung zu existierenden Werkzeugen, deren Nutzung zusätzliches Wissen erfordert, vereinfacht EPerF diese Aufgabe durch Verwendung einfacher Schnittstellen und durch die Beschränkung auf spezifische Messgrößen. Für die Visualisierung und Analyse der Messdaten

wurde eine Web-Applikation entwickelt, die eine schnelle vergleichende Analyse von Messungen aus unterschiedlichen Experimenten ermöglicht. Somit sind Verbesserungen und Defizite bei alternativen Implementierungen schnell und übersichtlich erkennbar.

Eine besondere Herausforderung, die im ENHANCE-Projekt bearbeitet wird, ist die Unterstützung von Time-Sharing auf den Many-Core-Prozessoren als Teil des Ressourcenmanagements. Der vom Projektpartner Paderborn entwickelte Scheduler ermöglicht die dynamische Zuweisung von Anwendungsblöcken auf heterogenen Komponenten. Für die Entscheidung der Platzierung von Anwendungen auf die Ressourcen werden Zusatzinformationen (Metadaten) für jede Anwendungsfunktion benötigt. Die Affinität ist ein Metadatum, um die Optimalität einer Software-Hardware-Kombination zu beschreiben. Sie wird aus der Modellierung der Laufzeit und aus Laufzeitmessungen auf unterschiedlichen Plattformen gewonnen.

In heutigen Plattformen haben Many-Core-Prozessoren als heterogene Komponente keinen direkten Zugriff auf Daten im normalen Speicher des Hosts. Daher benötigt der Scheduler als weiteres Metadatum das zu transferierende Datenvolumen, wenn Daten vom normalen Speicher des Hosts auf Speicher der heterogenen Komponente übertragen werden müssen. Die für den Datentransfer benötigte Zeit muss beim Scheduling berücksichtigt werden. Ist für eine Komponente die Datentransferzeit größer als die eigentliche Rechenzeit, so wäre die Verwendung dieser Komponente kontraproduktiv. Zur Bestimmung des zu übertragenden Datenvolumens haben wir ein Verfahren entwickelt, welches die benötigten Informationen automatisiert bereitstellt.²

¹ENHANCE Performance Framework, <http://github.com/sdressler/EPerF> ²Dreßler, S. und Steinke, T., A Novel Hybrid Approach to Automatically Determine Kernel Interface Data Volumes, ZIB-Report 12-23, 2012

PROJEKTE DER ABTEILUNG PARALLELE UND VERTEILTE SYSTEME

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

4CAAST –

Building the PaaS Cloud of the Future

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/4caast.html

Mitarbeiter: N. Kruber, F. Schintke, T. Schütt
Partner: Telefonica, 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 Anfragemlast (sog. flash crowds) flexibel bedienen zu können. Für die Einbettung in PostgreSQL wird **Scalaris** um entsprechende Schnittstellen ergänzt.

ASTRO VDZ

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 **XtreemFS**.

C3-INAD –

Infrastructure for General Access to Climate Data

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

Mitarbeiter: J. Bachmann, U. Golas, M. Jorra, 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.

CONTRAIL –

Open Computing Infrastructures for Elastic Services

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/contrail.html

Mitarbeiter: M. Berlin, R. Döbbelin, B. Kolbeck, M. Noack, P. Schäfer, T. Schütt, J. Stender
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 Förderierung von Clouds, um Anwenderprogramme auf mehreren Cloud-Systemen ausführen zu können.

D-GRID KERNKNOTEN

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

Mitarbeiter: F. Schintke, M. Höggqvist, M. Jorra, B. Kolbeck, K. Sobe, P. Schäfer, 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 T Byte 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.

DGSI –

D-Grid Scheduler Integration

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/dgsi.html

Mitarbeiter: F. Schintke, 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.

ENHANCE –

Enabling heterogeneous hardware acceleration using novel programming and scheduling models

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/enhance.html

Mitarbeiter: T. Steinke, S. Dreßler, I. Merkulow, 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.

HARNESS

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/harness.html

Mitarbeiter: T. Schütt

Partner: Imperial College London (UK), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Schweiz), Université de Rennes 1 (Frankreich), Maxeler Technologies (UK), SAP AG (Irland)

Forschungsförderung: EU (FP7-ICT-318521)

Inhalt: Im EU-Projekt Harness wird ein Platform-as-a-Service (PaaS) Software Stack entwickelt, der heterogene Hardware-Ressourcen und innovative Netzwerk-Technologien unterstützt. Wir sind hauptsächlich im Storage-Bereich tätig und werden durch den gemischten Einsatz von Festplatten und SSDs individuell für den Benutzer konfigurierte Storage-Lösungen entwickeln. Dazu setzen wir **XtreemFS** ein. Der Benutzer wird pro Volume festlegen können, ob der Datenzugriff – zum Beispiel für den Einsatz von Datenbanken – für den schnellen wahlfreien Zugriff (random access) oder für schnellen sequentiellen Zugriff (data streaming) optimiert werden soll. Über Service Level Agreements (SLAs) kann der Benutzer definieren, welche Leistung er für seine Anwendung benötigt.

**IRIS –
Integratives Forschungsinstitut für die
Naturwissenschaften Adlershof**

URL: www.iris-adlershof.de

Mitarbeiter: A. Reinefeld, T. Steinke

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.

LABIMI/F

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/labimif.html

Mitarbeiter: T. Steinke

Partner: Universitätsmedizin Göttingen, Universitätsklinikum Magdeburg, Universitätsklinikum Schleswig-Holstein, Arbeitsgemeinschaft der Wissenschaftlichen Medizinischen Fachgesellschaft e. V., Technologie- und Methodenplattform für die vernetzte medizinische Forschung e. V.

Forschungsförderung: DFG

Inhalt: Ziel des Vorhabens ist es, präzise Anforderungen an die Langzeitarchivierung für biomedizinische Daten zu erarbeiten und für diese Aufgabe ein technologisches Konzept zu entwickeln. Im Projekt werden zunächst beispielhaft das Datenmanagement in der medizinischen Bildverarbeitung und der Genomforschung näher betrachtet. Aufgrund der Komplexität des Managements langfristiger Daten im allgemeinen biomedizinischen Kontext werden wichtige Aspekte mit einer mehrstufigen Methodik in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgemeinschaft der Wissenschaftlichen Medizinischen Fachgesellschaften (AWMF) herausgearbeitet.

**METRIK –
Modellbasierte Entwicklung von Techno-
logien für selbstorganisierende dezentrale
Informationssysteme im Katastrophenma-
nagement**

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/metrik.html

Mitarbeiter: J. Geibig, K. Sobe

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.

**MOSGRID –
MOLECULAR SIMULATION GRID**

URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/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.

PNEUMOGRID

URL: www.pneumogrid.de

Mitarbeiter: K. Sobe, T. Steinke

Inhalt: 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.

**WISSGRID –
Grid für die Wissenschaft**

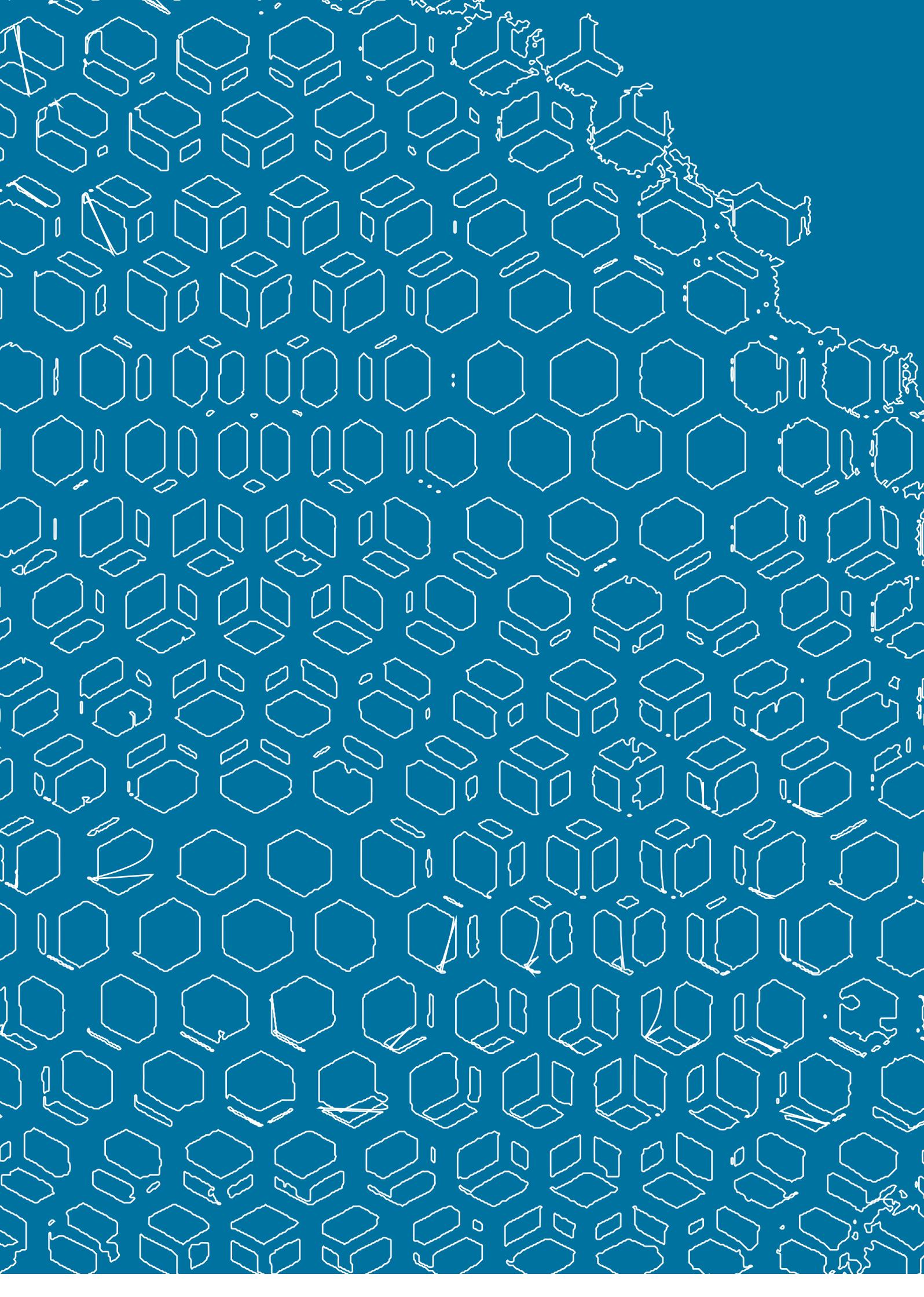
URL: www.zib.de/de/pvs/projekte/projektetails/article/wissgrid.html

Mitarbeiter: F. Schintke, K. Sobe

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.





SUPERCOMPUTING

Schnelle Computer, schnelle Algorithmen



DER HLRN-SUPERCOMPUTER AM ZIB

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Detlef Kehl, Rainer Klaus, Guido Laubender, Matthias Läuter, Christian Schimmel, Frank Schmitz, Thomas Steinke, Manfred Stolle, Christian Tuma, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny

Weitere Informationen unter: www.zib.de/de/HPC/serv und www.hlrn.de



◀ Das HLRN-System am ZIB umfasst insgesamt 49 Computerschränke. Dabei befinden sich die Rechnersysteme in 28, die Plattensysteme in 13, die InfiniBand-Netzwerk-Switches in sechs und die Verwaltungsserver in zwei 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 im Dezember 2012 erfolgten Beitritt des Landes Brandenburg zum HLRN-Verbund werden in Zukunft auch die Brandenburger Wissenschaftler von der Supercomputer-Infrastruktur und der HPC-Fachberatung profitieren können. 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

Die Systemarchitektur des HLRN-Supercomputers spiegelt die besonderen Anforderungen der Wissenschaftler im norddeutschen Bereich wider. Als Hauptkomponente steht ein massiv-paralleler Hochleistungsrechner (MPP-System) mit Infiniband-Netzwerk für Programme mit mehreren tausend parallelen Prozessen zur Verfügung. Daneben existieren kleinere Teilsysteme (SMP-System) für Programme, die bei moderater Parallelität einen großen gemeinsamen Hauptspeicher benötigen. Die Technik des HLRN-II-Systems wurde von der Firma SGI geliefert und besteht aus zwei identischen Installationen an den Standorten Berlin und Hannover. Der Endausbau des HLRN-II-Systems



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Das ZIB betreibt gemeinsam mit dem Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen das verteilte Hochleistungsrechnersystem des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen. Der HLRN-Supercomputer stellt Rechenkapazität sowohl für hochparallele Anwendungen als auch für moderat parallele Anwendungen mit sehr großen Hauptspeichieranforderungen von bis zu 2 TB zur Verfügung. Mit der Vertragsunterzeichnung im Dezember 2012 für das Nachfolgesystem HLRN-III wurden die Grundlagen für die erfolgreiche Fortführung des Hochleistungsrechnens im norddeutschen Raum gelegt.

umfasst pro Standort 48 Knoten vom Typ XE, 320 Knoten vom Typ ICE1, 960 Knoten vom Typ ICE2 und fünf Systeme vom Typ Ultra-Violet. Damit können moderat parallele Anwendungen bis zu 2 TByte Hauptspeicher pro Einzelprozess adressieren. Hochparallele Anwendungen können sogar über bis zu 7680 Rechenkerne verfügen, die über das Message Passing Interface Daten austauschen können.

DAS NACHFOLGESYSTEM HLRN-III

Im Herbst 2013 wird am ZIB die Berliner Komponente des nachfolgenden HLRN-Supercomputersystems in Betrieb gehen. Dazu wurde im Dezember 2012 der Kaufvertrag zwischen dem ZIB und der Firma CRAY unterzeichnet. Mit dem neuen HLRN-III-System, basierend auf den neuesten Prozessor-, Netzwerk- und Speichertechniken, wird den Nutzern rund die 10-fache Anwendungsleistung zur Verfügung stehen. Das folgende Schema zeigt die technischen Daten des zukünftigen HLRN-III-Systems im

Vergleich zu dem derzeit betriebenen HLRN-II (als Summe über beide Komplexe in Berlin und Hannover). Der HLRN-III besteht aus MPP- und SMP-Komponenten und wird wie bisher etwa symmetrisch verteilt an den HLRN-Standorten Berlin und Hannover betrieben. Die MPP-Komponente ist ein CRAY XC30-System und wird im Endausbau ca. 85.000 CPU-Kerne und ca. 222 TB Hauptspeicher mit einer Spitzenleistung von nahezu 2.5 PFlop/s umfassen. Von dieser Architektur werden insbesondere die hochparallel skalierenden Anwendungen profitieren. Die SMP-Komponente mit ca. 2.300 CPU-Kernen und 24 TB Hauptspeicher eignet sich dagegen für speicherintensive Anwendungen moderater Parallelität. Die Kapazität des globalen Festplattensystems, das auf einem Lustre-Dateisystem basiert, wird sich auf ca. 7 PB erhöhen. Mit diesem im Vergleich zum HLRN-II fast fünffachen Volumen wird das System dem steigenden Bedarf an Datenhaltungskapazitäten komplexer Anwendungen gerecht.

Vergleich HLRN-II und HLRN-III (Berlin und Hannover)



Juli 2008 – Aug. 2013

26.112 CPU-Kerne

128 TByte Speicher

290 TFlop/s



Sept. 2013 – Aug. 2018

87.680 CPU-Kerne

255 TByte Speicher

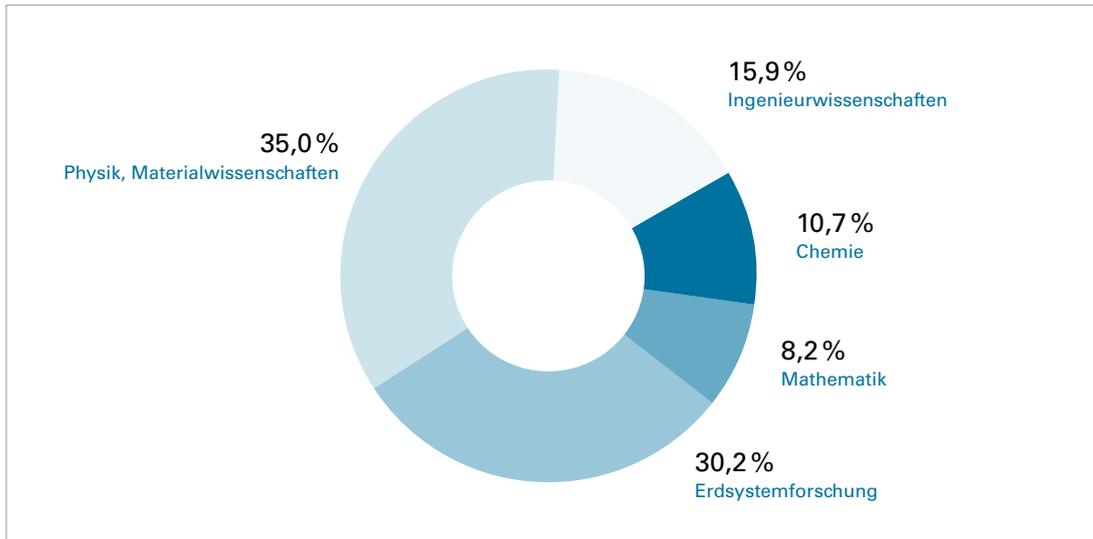
2.600 TFlop/s



HLRN-FACHBERATUNG

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann, Hans-Hermann Frese, Detlef Kehl, Rainer Klaus, Guido Laubender, Matthias Läuter, Christian Schimmel, Frank Schmitz, Thomas Steinke, Manfred Stolle, Christian Tuma, Matthias Wittenberg, Stefan Wollny

Weitere Informationen: www.zib.de/HPC und www.hlrn.de



◀ Rechenzeitverbrauch 2012 der Fachgebiete auf dem HLRN-Supercomputer

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 Grenzgebiet 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.

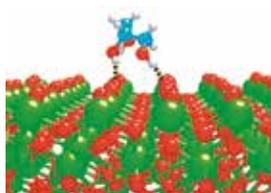
Im Vergleich mit früheren Rechnern besitzen heutige Hochleistungsrechner eine weitaus komplexere Systemarchitektur mit hundert-

Das Profil des HLRN

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.



Ein durch H-Brücken an einer Zirkoniumdioxidoberfläche gebundenes Glycerolmolekül ▲

tausenden von Rechenkernen, einem schnellen Kommunikationsnetzwerk und einem ausgegogen 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 – Wissenschaftler aus dem jeweiligen Anwendungsgebiet oder aus einem verwandten Fach. Die Fachberatung umfasst die Mitarbeit in Forschungsvorhaben, die Diskussion geeigneter numerischer Verfahren und der anzuwendenden Algorithmen sowie 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. Einen wichtigen Punkt stellt dabei auch die Unterstützung der Projekte in Bezug auf Datenhaltung und Datenverarbeitung dar. Die Erzeugung, Verarbeitung, Organisation und langfristige Speicherung stetig wachsender Datenmengen erfordert oft einen beträchtlichen Aufwand und Zeitanteil im Arbeitsablauf der Projekte.



Vortrag und Betreuung der Programmierübungen im Kurs „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ ▲

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) und Lehrveranstaltungen, organisieren Anwenderworkshops und beteiligen sich an Forschungsprojekten, die dem wissenschaftlichen Austausch und der Überführung neuester HPC-Software-Methodik in die Anwendungsgebiete dienen. Enge 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 des letzten Treffens in Rostock war die Vorbereitung der Ausschreibung des Nachfolgesystems HLRN-III. Diskutiert wurden von den Teilnehmern u. a. die Software-Anforderungen aus Nutzersicht sowie die Anforderungen an ausschreibungsrelevante Anwendercodes als Bestandteil der Benchmarksuite.

COMPUTATIONAL CHEMISTRY

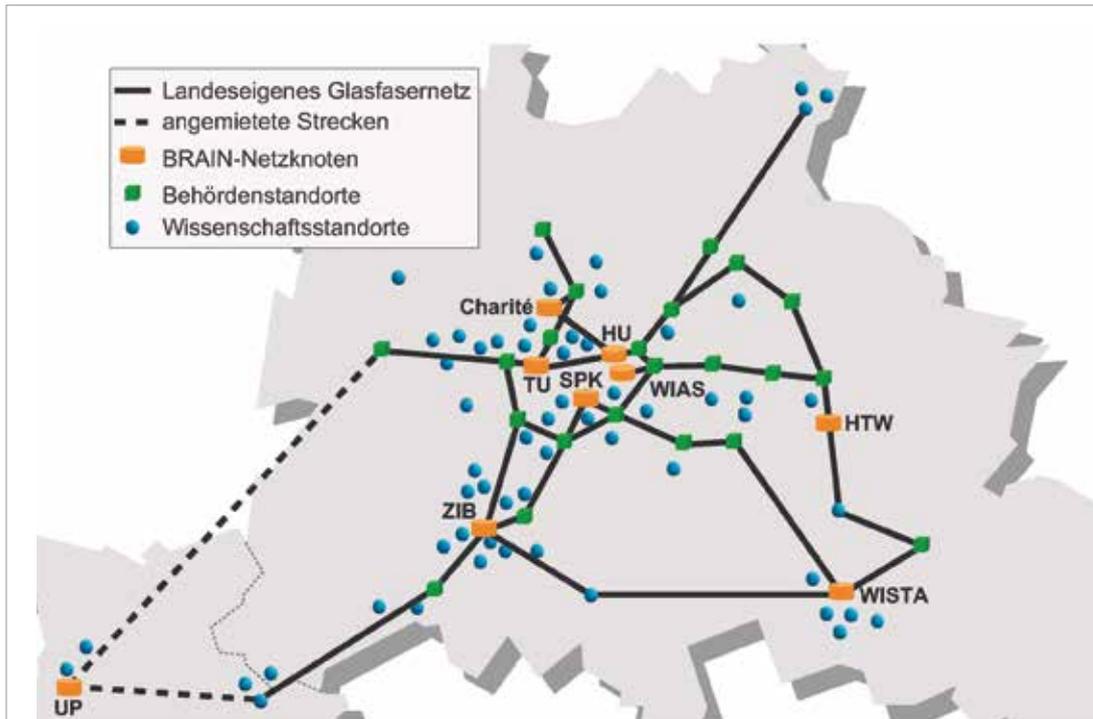
Unter der aktiven Mitarbeit der Fachberater ist es in einem chemischen Forschungsprojekt gelungen, Vorhersagen darüber zu treffen, ob und wie sich thermische Zersetzungsreaktionen bestimmter organischer Grundsubstanzen (Glycerol, Propylenglykol, Triacetin) in Gegenwart ausgewählter Festkörperoberflächen beeinflussen lassen. Dazu wurden massiv parallele Rechnungen mit Methoden der Dichtefunktionaltheorie an periodischen Strukturmodellen mit mehreren Hundert Atomen durchgeführt. Die Ergebnisse können z. B. wichtige Hinweise darauf geben, welche Materialien und Bedingungen im alltäglichen Bereich der Nahrungszubereitung (Kochen und Braten) die Bildung gesundheitsschädlicher Substanzen begünstigen bzw. erschweren¹.

¹Tuma, C., Laino, T., Martin, E., Stolz, S., Curioni, A., ChemPhysChem 14 (2013) 88

BRAIN – DAS BERLINER WISSENSCHAFTSNETZ

Bearbeitet von: Ursula Droebe, Stefan Wollny, Marek Fröhlich

Weitere Informationen unter: www.zib.de/brain und www.brain.de



TEILNEHMENDE EINRICHTUNGEN

AIP | BAM | BBAW | BBB |
 BHT | Charité | DA | 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

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 des Herstellers Transmode aufgelöst. Durch Ausnutzung der besonderen Eigenschaften des Lichtes werden mehrere lo-

gisch unabhängige Übertragungskanäle (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 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

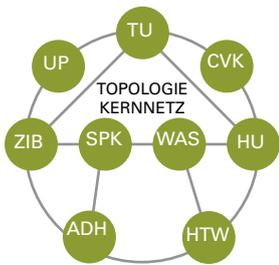
¹ **WDM:** Wavelength Division Multiplexing ermöglicht den zeitgleichen Transport vieler Datenströme durch Nutzung unterschiedlicher Wellenlängen in einem optischen Leiter (Glasfaser). ² **Regelanschluss:** Der DFN-Verein ist für die Bereitstellung des physikalischen Anschlusses einer Einrichtung (Zuleitung) 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.



DAS PROJEKT IN KÜRZE: Seit 1994 ist BRAIN (Berlin Research Area Information Network) 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) 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
Netiron MLX an Wissenschaftsstandorten
- 28 Teilnehmer aus Berlin/Potsdam
- 78 angeschlossene Standorte
- ca. 4,4 PetaByte akkumuliertes Datenaufkommen an Teilnehmer-Ports in 2012



NETIRON MLX

- non-blocking 400Gbps Switching-Kapazität
- Wire-speed Dual Stack für IPv4/IPv6
- MPLS⁴
- Quality of Service/Class of Service für Datenfluss-priorisierung
- umfangreicher BGP-4-Support für Internet-Routing

TRANSMODE, TS-1100

- Modular erweiterbar
- 4 optische Kanäle zu je 10Gbit/s über eine einzelne Glasfaser mehrfach pro Chassis konfigurierbar
- Zeitmultiplexing mehrerer Anwendungen pro optischen Kanal

Einrichtungen, die über Ethernet angebunden sind. Das Kernnetz wird aufgespannt durch neun über Berlin und Potsdam verteilte aufgestellte Netzknoten der Firma Brocade vom Typ NetIron 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 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 Anbindung von Standorten an das BRAIN, z. B. die Planung neuer Glasfaserstrecken, Beratung bei der Konfiguration der Anwenderge-

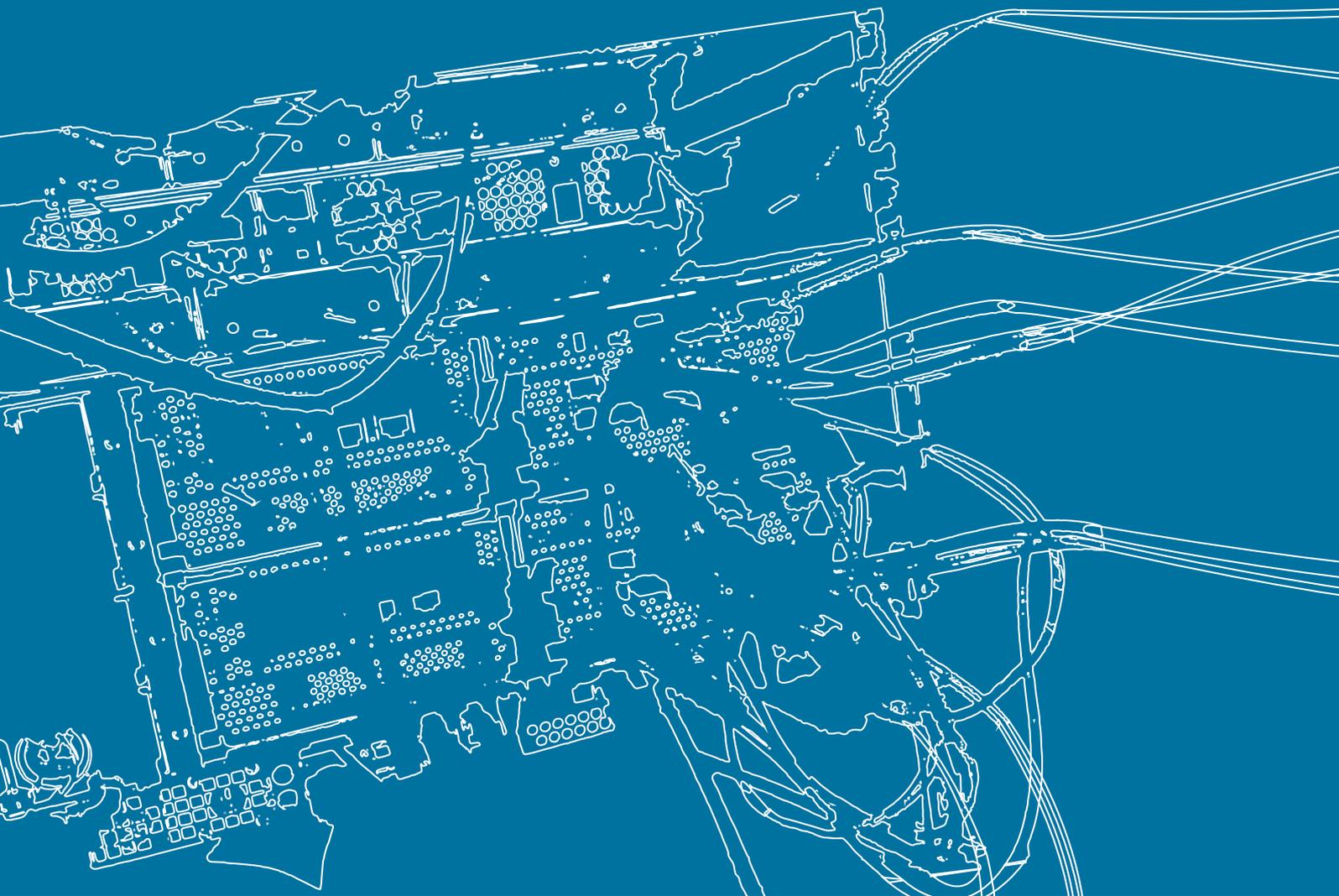
räte und die Unterstützung der Anwender im Störfall. Die Fehleranalyse im Glasfasernetz wird mit eigens dafür beschafftem Messequipment selbst durchgeführt. Soweit wie möglich erfolgt die Fehlerbeseitigung durch BRAIN-Mitarbeiter, andernfalls auch durch beauftragte Dritte.

PILOTPROJEKT: FREE-SPACE-OPTIC⁵ (FSO)

Was ist zu tun, wenn auf Grund örtlicher Gegebenheiten ein Standort nicht durch Glasfasern erschlossen werden kann? Eine Alternative zur klassischen Glasfaseranbindung kann FSOTEchnik sein. Um Erfahrungswerte mit der Verwendung dieser laserbasierten Technik für die Datenübertragung mit großen Bandbreiten (bis zu 1Gbit/s) zu sammeln, hat BRAIN auf dem Dach des Jacob-und-Wilhelm-Grimm-Zentrums und dem Dach des Berliner Zeughauses FSO-Technik installiert und in Betrieb genommen. Während der Laufzeit des Pilotprojekts erfolgen Last-, Performance- und Verfügbarkeits-tests. Die Laufzeit wird mindestens ein Jahr betragen, um alle jahreszeitlich bedingten Beeinflussungen (Schnee, Starkregen, Nebel etc.) beurteilen zu können.



⁴MPLS: Multi-Protokoll Label Switching wird genutzt für Virtual leased line (VLL), Virtual private LAN Service (VPLS), BGP MPLS/VPN, Multi-VRF, FastReroute.
⁵Free-Space-Optic: Laserbasierte Optische Freiraumübertragung





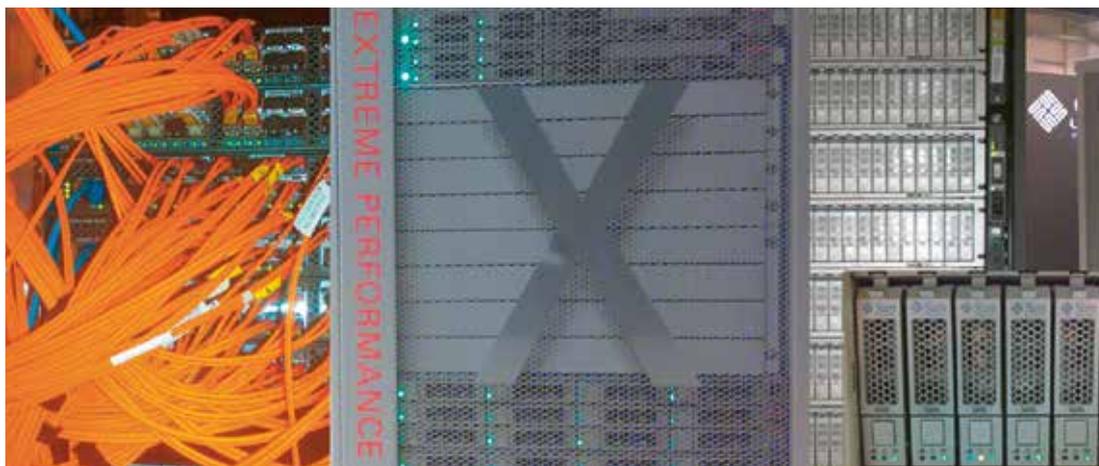
IT-SERVICE

Service für die Forschung

IT-SERVICE

Leitung: Wolfgang Pyszkalski

Weitere Informationen im WEB 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.

AKTIVITÄTEN IM JAHR 2012

Die Aktivitäten in diesem Jahr waren hauptsächlich von einer Erneuerung, Verbesserung und Erweiterung der den vorhandenen Diensten zu Grunde liegenden IT-Infrastruktur geprägt.

Einen großen Raum nahmen auch technische Untersuchungen und weitere Arbeiten für die Erstellung konkreter Planungen und Kalkulationen zur Durchführung von Vorhaben des ZIB ein, die für 2013 vorgesehen sind und für die wir um technische Unterstützung gebeten wurden.

Passend zum Termin von 20 Jahren Datenerhaltung mit Nutzung von Bandspeichersystemen konnten wir in diesem Jahr unsere Bandspeichersysteme um Laufwerke der neuesten Technologie erweitern.

Unser IP-Datennetz stellt mit ca. 1.800 Gigabit Ethernet Ports in den Netzkomponenten für jeden Arbeitsplatz im ZIB die erforderliche Zahl von Anschlüssen mit der Geschwindigkeit von einem Gigabit zur Verfügung. Im Bereich der Server und Außenanbindungen stehen im Netz Anschlüsse mit einer Geschwindigkeit von 10 Gigabit/s über OM3-Lichtwellenleiter zur Verfügung. Zwei Switches mit 88 Ports vom Typ 10 GE FCoE und 24 Fibre Channel Ports verbinden das IP-Netz mit dem Fibre Channel Speichernetzwerk (SAN).

Über das Speichernetzwerk mit seinen 672 Ports sind derzeit 36 Server mit 1.638 Platten in 17 Arrays verbunden. Einige der Server, die Plattenkapazität über IP-Protokolle bereitstellen, sind über das Speichernetzwerk zusätzlich mit den Bandrobotern verbunden, die mit 24 Robotern auf Magnetbandkassetten in 18.000 Stellplätzen zugreifen und die Bänder zwischen den Stellplätzen und den 60 Laufwerken transportieren.



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 im ZIB zu testen und so zur Verbesserung der Produkte beizutragen. Im Jahr 2008 ist die Abteilung als „Sun Center of Excellence für Daten- und Speicherma-
nagement“ 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 eine Herausforderung. Aus diesem Grund rüsten wir unsere Systemschränke mit speziellen Stromverteilungseinheiten (PDU) aus, die sowohl Messungen, als auch Schaltvorgänge mittels eigener Software ermöglichen.

JUBILÄUM DER DATENHALTUNG IM ZIB

20 Jahre Erfahrung mit einer Datenhaltung, die auf Bandarchiven mit Robotern basiert, sind Grund genug für einen kurzen Rückblick. Die folgende Tabelle zeigt die über die Zeit verwendeten Typen von Bandspeichersystemen und Bandlaufwerken sowie die jeweils maximale Kapazität pro Band.

Jahr	MB/Band	Bandroboter	Laufwerke
1991	200	STK 4400 ACS	IBM 3480
1994	800		IBM 3490E
1996	1.000		IBM 3490
1996	50.000		Redwood SD3
2000	50.000	STK 9310 ACS	Redwood SD3
	20.000	(Powderhorn)	STK T9840A
2007	200.000		STK T9940B
2007	200.000	STK SL8500	STK T9940B
	500.000		STK T10000A
2009	1.000.000		STK T10000B
2012	5.000.000		STK T10000C

Bei jeder Erweiterung oder Erneuerung der Bandspeichersysteme durch neue Technologien im Bereich der Laufwerke migrieren wir Teile des vorhandenen Datenbestandes auf Bänder der neuen Technologie. Dabei haben wir inzwischen einen Stand erreicht, der uns solche Aktivitäten im laufenden Betrieb und ohne Beeinträchtigung der Nutzung ermöglicht.

In diesem Jahr ist es uns gelungen, unsere Bandspeichersysteme mit einer größeren Zahl der zur Zeit neuesten Laufwerke vom Typ T10000 C hochzurüsten, was mehrere Vorteile bietet.

Durch die deutlich höhere Kapazität brauchen wir für die gleiche Menge an Daten weniger Stellplätze. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass wir ohne Erweiterung der Speichersysteme mehr Daten unterbringen können. Die

neuen Laufwerke sind mit 240 MB/s doppelt so schnell wie ihre Vorgänger T10000 B.

NEUE FUNKTIONALITÄTEN

Ein bislang immer vorhandenes Problem war der Nachweis, dass die auf Band geschriebenen Daten und die Daten auf den Platten wirklich völlig identisch sind. Die eingesetzten Verfahren zur automatischen Korrektur von Fehlern, mindestens aber zu deren Erkennung, sollten so etwas eigentlich sicherstellen. Nun gibt es in all den beteiligten Systemen (Plattenspeicher, Rechner, Datennetze, Bandspeichersystem) ein als „silent data corruption“ bekanntes Problem. Dabei kann, wenn auch nur mit extrem geringer Wahrscheinlichkeit, eine Kombination von gleichzeitig auftretenden Fehlern dazu führen, dass das Problem in der entsprechenden Komponente nicht erkannt wird.

Die Abhilfe bestand bislang darin, die Daten auf das Band zu schreiben, dann vom Band wieder in eine Kopie auf der Platte zu lesen und schließlich Original und Kopie auf der Platte zu vergleichen. Dies ist ein hoher Aufwand, der jedoch für Daten, bei denen auch die geringste Abweichung gravierende Auswirkungen haben kann, angebracht ist.

Die neuen Laufwerke bieten nun, zusammen mit der aktuellen Version der von uns eingesetzten Software SAM-FS (Storage and Archive Manager File System), die Möglichkeit einer automatischen Prüfung auf Systemebene, bei der die abschließende Prüfung ohne Zurückkopieren der Daten, direkt im Bandlaufwerk, erfolgen kann. Für das spätere Lesen der Daten sind diese neu eingesetzten Prüfverfahren natürlich ebenso hilfreich.

ZENTRALE DATENHALTUNG IM ZIB

Bearbeitet von: Wolfgang Pyszkalski, Dirk Krickel, The Anh Pham

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



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.

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 vom 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 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.

In diesem Tresorraum fungieren drei Bandspeichersysteme SL8500 als zwei voneinander unabhängige Archive, in denen auf Anforderung unserer Server insgesamt 24 Roboter Magnetbandkassetten zwischen den 18.000 Stellplätzen und den 60 Bandlaufwerken transportieren.

Jede Datei wird immer in zwei Kopien auf die Bänder geschrieben. Da wir dafür sorgen, dass die Kopien immer auf die beiden voneinander unabhängigen Archive verteilt werden, kann ein Fehler in einem der Archive niemals beide Kopien gleichzeitig beschädigen.

Die räumlichen Dimensionen sind in dem Bild erkennbar, das im rechten Teil einen Mitarbeiter in einem der sechs Gänge der Bandspeichersysteme bei Wartungsarbeiten zeigt.



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/SAM-FS/ 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.

Mit den in diesem Jahr beschafften Bandlaufwerken des neuesten Typs und der aktuellen HSM-Software (SAM-FS) ist eine automatische Verifizierung der Authentizität auf Band geschriebener Daten möglich (Nachweis, dass die Daten auf Band absolut identisch mit den Daten auf den Platten 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, Ergebnisse von Messungen aus Experimenten, digitalisierte 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 Reproduzierbarkeit der Daten sicher, ohne uns um deren Inhalte zu kümmern. Auch ein durch die Weiterentwicklung bedingter Wechsel der zu Grunde liegenden Technik und das dadurch notwendige 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 Alarme, 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.





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
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

MATHEMATIK UND INFORMATIK FÜR DIE ÖFFENTLICHKEIT

SOFTWARE UND SERVICE

WISSENSCHAFTLICHE NACHWUCHSFÖRDERUNG AM ZIB

VERANSTALTUNGEN FÜR KINDER UND JUGENDLICHE



Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ZIB bemühen sich seit vielen Jahren, mehr qualifizierte junge Menschen für Mathematik und Informatik zu interessieren. Zahlreiche Aktivitäten sollen Ihnen die Vielfalt der Mathematik näher bringen, denn Mathematik ist nicht langweilig und abstrakt, sondern macht Spaß. Mit Mathematik kann man die Probleme des Alltags verstehen und lösen.

Die Beschäftigten des ZIB sind auch im Jahre 2012 häufiger Gast in Berliner und Brandenburger Schulen gewesen und haben dort von ihrer Arbeit erzählt und sich den kritischen Fragen der Schülerinnen und Schüler gestellt. In den Räumlichkeiten des ZIB fanden im Jahr 2012 21 Veranstaltungen mit insgesamt 290 Schülerinnen und Schülern statt. Darüber hinaus unterstützte das ZIB Schulen mit für Wissenschaftszwecke nicht mehr benötigter Hardware und betreibt die informationstechnische Infrastruktur für den zentralen Server der Berlin Schulen.

Die Mitarbeiter/innen des ZIB engagieren sich auch im Rahmen des „Digitalen Adventskalender“ des DFG-Forschungszentrum MATHEON. Jedes Jahr öffnen sich zur Adventszeit 24 Türchen mit Mathe-Aufgaben. Der Schwierigkeitsgrad der Aufgaben entspricht etwa dem Niveau der 10.–13. Klassenstufe. Diejenigen Mathebegeisterten, die die Aufgabe richtig lösen, haben die Chance auf einen Gewinn. Die Aufgaben des ZIB gehören zu den spannendsten und beliebtesten, denn die ZIB-Mitarbeiterin Marika Karbstein hat in 2011 und 2012 den Preis für die „Ultimative Mathe-Aufgabe“ gewonnen.

Großen Zulauf erhält das ZIB traditionell in der „Langen Nacht der Wissenschaften“. Die Veranstaltungen waren mit 1974 Besuchern wiederum gut nachgefragt. Neben vielen Vorträgen, dem „Computerbasteln“ und dem „Science-Slam“, waren die Führungen im Rechnerraum zum Hochleistungsrechner, Erläuterungen zur langfristigen Datenhaltung sowie das 3D-Wis-

senschaftskino im ZIB-eigenen „Studio Da Vinci“ besondere Highlights. Wie jedes Jahr hielt Prof. Horst Zuse, der älteste Sohn Konrad Zuses, Vorträge zur Geschichte des Computers und zur Arbeit seines Vaters, die auf großes Interesse stießen.

Wie bereits in den vergangenen Jahren beteiligte sich das ZIB auch 2012 am bundesweiten „Girls' Day“. Mädchen der 5.–10. Klasse erhielten Einblicke in die am ZIB vertretenen Berufsfelder. In den angebotenen Workshops „Spiele selber programmieren“, „Online-Versteigerungen“, „Keine Angst vor großen Computern“ und „Mathe-Puzzle“ präsentierten vor allem Mitarbeiterinnen des Instituts technische Details und algorithmische Probleme im Umgang mit Computern sowie Inhalte aktueller Arbeiten. Die teilnehmenden Mädchen konnten das erlernte Wissen in praktischen Übungen ausprobieren.

AUSZEICHNUNGEN UND RUF

Ralf Borndörfer

- Ruf auf eine Professur „Diskrete Mathematik“ mit dem Schwerpunkt Diskrete Optimierung in den Verkehrswissenschaften an der Freien Universität Berlin (W2-S)

Fabio D'Andreagiovanni

- Excellent Presentation Award of the ESF-JSPS Frontier Science Conference for Young Researchers
- Sapienza Doctoral Dissertation Award

Peter Deuffhard

- Goldene Ehrennadel der Freien Universität Berlin
- Senior-Professur „Numerische Analysis“, Institut für Mathematik, Freie Universität Berlin
- Ehrenprofessor, Beijing University of Technology, China
- Ruf auf eine Professur „Applied Mathematics and Computational Science“, King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal, Saudi-Arabien: nicht realisiert

Moritz Ehlke, Heiko Ramm, Hans Lamecker und Stefan Zachow

- Best Poster Award für „Efficient projection and deformation of volumetric intensity models for accurate simulation of X-ray images“ auf dem „Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM)“ in Norrköping, Schweden

Armin Fügenschuh

- Ruf auf eine W2-Professur „Angewandte Mathematik“ an der Helmut-Schmidt-Universität/Universität der Bundeswehr, Hamburg

Julia Goltz, Doreen Thiede

- 2nd Best Poster Award für „Cloud-computing and Libraries - A German Perspective“ auf der „20. BOB-CATSSS-Tagung“ in Amsterdam, Niederlande

Kiran Hiremath

- Ruf auf eine Assistenzprofessur „Mathematik & Statistik“, Indian Institute of Technology Rajasthan, Indien

Jens Kasten, Ingrid Hotz, Hans-Christian Hege

- Best Paper Award für die Arbeit „Vortex Merge Graphs in Two-dimensional Unsteady Flow Fields“ (Kategorie Short Papers) auf der Konferenz „Eurographics Conference on Visualization – EuroVis 2012“ in Wien, Österreich

Norbert Lindow, Daniel Baum, Ana-Nicoleta Bondar, Hans-Christian Hege

- Honorable Mention Award für die Arbeit „Dynamic Channels in Biomolecular Systems: Path Analysis and Visualization“ auf der Konferenz „IEEE Symposium on Biological Data Visualization 2012“ in Seattle, WA, USA

Thomas Schlechte

- Dissertationspreis der Gesellschaft für Operations Research (GOR)
- VBKI Wissenschaftspreis

Alexander Wiebel

- Listenplatz bei Bewerbung um die Professur „Numerische Mathematik, Wissenschaftliches Rechnen, Visualisierung“ an der FH Aachen

Stefan Zachow, Hans Lamecker

- MATHEON-Ausgründungspreis für den erfolgreichen Transfer von Forschungsergebnissen aus dem MATHEON in die Wirtschaft durch Gründung des ZIB Spin-offs 1000 shapes GmbH

PUBLIKATIONEN

PREPRINTS

Der Zugriff auf die ZIB-Reports des Jahres 2012 erfolgt über den Link:

www.zib.de/de/publikationen/zib-reports2012.html

MITHERAUSGABE VON PUBLIKATIONEN

Ralf Borndörfer

- Area Coordinator, Optimization Online, Mathematical Programming Society

Peter Deuffhard

- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag
- Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications, Global Science Press, Beijing
- International Journal of Computer Mathematics, Taylor & Francis, London

Armin Fügenschuh

- Gasteditor (mit Gerhard-Wilhelm Weber) einer Sonderausgabe der Zeitschrift „Optimization“ zur Konferenz EURO 2010 (erschien 2012)

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

- ORTransactions, 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, New York
- Journal of Mathematics in Industry, A new journal of the European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg
- Journal of the Operations Research Society of China, Springer-Verlag

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)

Thorsten Koch

- Mathematical Programming Computation, A journal of the Mathematical Programming Society, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Optimization Methods and Software, Taylor & Francis, London
- Numerical Algebra, Control and Optimization, American Institute of Mathematical Sciences, Springfield, USA

Alexander Reinefeld

- Journal of Grid Computing (JoGC), Kluwer Academic Publisher
- International Journal of Grid and Utility Computing (IJGUC)
- International Journal of Computational Sciences (IJCS)

Thomas Steinke

- Gasteditor der Sonderausgabe „High-Performance Reconfigurable Computing“ der Zeitschrift International Journal of Reconfigurable Computing, Hindawi Publishing Corp. 2012, Cairo, New York

Martin Weiser

- Journal of Applied Mathematics, Hindawi Publishing Corporation, Cairo, New York

BEITRÄGE IN ZEITSCHRIFTEN UND TAGUNGSBÄNDEN

1. T. Achterberg, T. Berthold, and G. Hendel. **Rounding and propagation heuristics for mixed integer programming.** In D. Klatte, H.-J. Lüthi, and K. Schmedders (eds.), *Operations Research Proceedings 2011*, pages 71–76. Springer Berlin, Heidelberg, 2012.
2. C. Auer, C. Stripf, A. Kratz, and I. Hotz. **Glyph- and texture-based visualization of segmented tensor fields.** *International Conference on Information Visualization Theory and Applications (IVAPP'12)*, 2012.
3. V. E. Babicheva, S. S. Vergeles, P. E. Vorobev, and S. Burger. **Localized surface plasmon modes in a system of two interacting metallic cylinders.** *J. Opt. Soc. Am. B*, 29:1263, 2012.
4. C. Becker, D. Lockau, T. Sontheimer, P. Schubert-Bischoff, E. Rudigier-Voigt, M. Bockmeyer, F. Schmidt, and B. Rech. **Large-area 2D periodic crystalline silicon nanodome arrays on nanoimprinted glass exhibiting photonic band structure effects.** *Nanotechnology*, 23(13):135302, 2012.
5. R. Bertelmann, S. Szott, and T. Höhnnow. **Discovery jenseits von all you can eat und one size fits all.** *Bibliothek Forschung und Praxis*, 36(3): 369–376, 2012.
6. T. Berthold, A. M. Gleixner, S. Heinz, T. Koch, and Y. Shinano. **Solving mixed integer linear and nonlinear problems using the SCIP Optimization Suite.** In M. Muramatsu (ed.), *Proceedings of the Twenty-Fourth RAMP symposium*, pages 165–192. The Operations Research Society of Japan (RAMP: Research Association of Mathematical Programming), 2012.
7. T. Berthold, A. M. Gleixner, S. Heinz, and S. Vigerske. **Analyzing the computational impact of MIQCP solver components.** *Numerical Algebra, Control and Optimization*, 2(4):739–748, 2012.
8. T. Berthold, S. Heinz, and S. Vigerske. **Extending a CIP framework to solve MIQCPs.** In J. Lee and S. Leyffer (eds.), *Mixed Integer Nonlinear Program-*

ming, volume 154 of *The IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, pages 427–444. Springer, 2012.
9. M. Bindernagel, D. Kainmueller, H. Ramm, H. Lamecker, and S. Zachow. **Analysis of inter-individual anatomical shape variations of joint structures.** *Proc. Int. Society of Computer Assisted Orthopaedic Surgery (CAOS)*, number 210, 2012.
10. 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, T. Steinke, K. Warzecha, and M. Wewior. **MoSGrid: Efficient data management and a standardized data exchange format for molecular simulations in a Grid environment.** *Journal of Cheminformatics*, 4 (Suppl 1): P21, May 2012.
11. A. Bley, F. D'Andreagiovanni, and D. Karch. **WDM replacement scheduling.** *Proc. of the 11th INFORMS Telecommunications Conference*, Boca Raton, USA, 2012.
12. A. Bley, A. M. Gleixner, T. Koch, and S. Vigerske. **Comparing MIQCP solvers to a specialised algorithm for mine production scheduling.** In H. G. Bock, H. X. Phu, R. Rannacher, and J. P. Schölder (eds.), *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes: Proceedings of the Fourth International Conference on High Performance Scientific Computing*, March 2–6, 2009, Hanoi, Vietnam, pages 25–40. Springer, 2012.
13. M. Blome, K. McPeak, S. Burger, F. Schmidt, and D. Norris. **Back-reflector optimization in thin-film silicon solar cells using 3D finite element simulations.** In *Int. Conf. on Scientific Computing in Electrical Engineering (SCEE)*, 2012.
14. M. Bock, J. Skibina, D. Fischer, R. Grunwald, S. Burger, V. Beloglazov, and G. Steinmeyer. **10-fs pulse delivery through a fiber.** *CLEO: Science and Innovations*, page CTh3G.3. Optical Society of America, 2012.
15. B. Bodermann, P.-E. Hansen, S. Burger, M.-A. Henn, H. A. Gross, M. Bär, F. Scholze, J. Endres, and M. Wurm. **First steps towards a scatterometry reference standard.** *Proc. SPIE*, 8466: 84660E, 2012.
16. H. Boer, C. Stötzel, S. Röblitz, and H. Woelders. **A differential equation model to investigate the dynamics of the bovine estrous cycle.** In I. I. Goryanin and A. B. Goryachev (eds.), *Advances in Systems Biology*, volume 736 of *Advances in Experimental Medicine and Biology*, pages 597–605. Springer New York, 2012.
17. H. M. T. Boer, M. Apri, J. Molenaar, C. Stötzel, R. Veerkamp, and H. Woelders. **Candidate mechanisms underlying atypical progesterone profiles as deduced from parameter perturbations in a mathematical model of the bovine estrous cycle.** *Dairy Science*, 95(7):3837–3851, 2012.
18. R. Borndörfer and C. H. Cardonha. **A binary quadratic programming approach to the vehicle positioning problem.** H.-G. Bock, X. P. Hoang, R. Rannacher, and J. P. Schölder (eds.), *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes*, *Proceedings of the Fourth International Conference on High Performance Scientific Computing*, March 2–6, 2009, Hanoi, Vietnam, pages 41–52. Springer Verlag, 2012.
19. R. Borndörfer and O. Heismann. **Minimum cost hyperassignments with applications to ICE/IC rotation planning.** In D. Klatte, H.-J. Lüthi, and K. Schmedders (eds.), *Operations Research Proceedings 2011*, pages 59–64. Springer Verlag, 2012.
20. R. Borndörfer and N. D. Hoang. **Determining fair ticket prices in public transport by solving a cost allocation game.** In H.-G. Bock, X. P. Hoang, R. Rannacher, and J. P. Schölder (eds.), *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes*, *Proceedings of the Fourth International Conference on High Performance Scientific Computing*, March 2–6, 2009, Hanoi, Vietnam, pages 53–64. Springer Verlag, 2012.

21. R. Borndörfer and M. Karbstein. **A direct connection approach to integrated line planning and passenger routing.** In D. Delling and L. Liberti (eds.), editors, 12th Workshop on Algorithmic Approaches for Transportation Modelling, Optimization, and Systems, volume 25 of Open Access Series in Informatics (OASlcs), pages 47–57, Dagstuhl, Germany, 2012. Schloss Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik.
22. R. Borndörfer, B. Erol, T. Graffagnino, T. Schlechte, and E. Swarat. **Optimizing the Simplon railway corridor.** Annals of Operations Research, pages 1–14, 2012.
23. R. Borndörfer, I. Friedow, and M. Karbstein. **Optimierung des Linienplans 2010 in Potsdam.** Der Nahverkehr, 4:34–39, 2012.
24. R. Borndörfer, M. Karbstein, and M. E. Pfetsch. **Models for fare planning in public transport.** Discrete Appl. Math., 160(18):2591–2605, 2012.
25. R. Borndörfer, M. Karbstein, and M. E. Pfetsch. **The Steiner connectivity problem.** Mathematical Programming, 2012.
26. R. Borndörfer, A. Langenhan, A. Löbel, C. Schulz, and S. Weider. **Duty scheduling templates.** In J. C. Muñoz and S. Voß (eds.), Proc. Conference on Advanced Systems for Public Transport 2012 (CASPT12), 2012.
27. R. Borndörfer, A. Löbel, M. Reuther, T. Schlechte, and S. Weider. **Rapid branching.** In J. C. Muñoz and S. Voß (eds.), Proceedings of the 12th International Conference on Advanced Systems for Public Transport (CASPT12), Santiago, Chile, 2012.
28. R. Borndörfer, B. Omont, G. Sagnol, and E. Swarat. **A Stackelberg game to optimize the distribution of controls in transportation networks.** Proceedings of the 3rd International Conference on Game Theory for Networks (GAMENETS 2012), volume 105 of Lecture Notes of the ICST, pages 224–235, Vancouver, Canada, May 2012.
29. R. Borndörfer, M. Reuther, T. Schlechte, and S. Weider. **Vehicle rotation planning for intercity railways.** J. C. Muñoz and S. Voß (eds.), Proceedings of the 12th International Conference on Advanced Systems for Public Transport (CASPT12), Santiago, Chile, 2012.
30. R. Borndörfer, G. Sagnol, and E. Swarat. **An IP Approach to toll enforcement optimization on German motorways.** D. Klatte, H.-J. Lüthi, and K. Schmedders (eds.), Operations Research Proceedings 2011, Operations Research Proceedings, pages 317–322. Springer Berlin, Heidelberg, 2012.
31. R. Borndörfer, G. Sagnol, and E. Swarat. **A case study on optimizing toll enforcements on motorways.** In S. Ravizza and P. Holborn (eds.), 3rd Student Conference on Operational Research, volume 22 of Open Access Series in Informatics (OASlcs), pages 1–10. Schloss Dagstuhl – Leibniz-Zentrum für Informatik, 2012.
32. R. Borndörfer, T. Schlechte, and E. Swarat. **Railway track allocation – Simulation, aggregation, and optimization.** In Y.-Q. Ni and X.-W. Ye (eds.), Proc. 1st International Workshop on High-speed and Intercity Railways (IWHIR 2011), number 148 of Lecture Notes in Electrical Engineering, pages 53–70, 2012.
33. F. Broecker, K. Andrae, and K. Moelling. **Premature activation of the HIV RNase H drives the virus into suicide: A novel microbicide?** AIDS Research and Human Retroviruses, 28(11): 1397–1403, 2012.
34. S. Burger, J. Pomplun, and F. Schmidt. **Finite element methods for computational nano-optics.** In B. Bhushan (ed.), Encyclopedia of Nanotechnology, pages 837–843. Springer Netherlands, 2012.
35. C. Büsing and F. D’Andreagiovanni. **New results about multi-band uncertainty in robust optimization.** Proc. of SEA 2012, 11th Symposium on Experimental Algorithms, volume 7276 of LNCS, pages 63–74, Bordeaux, France, 2012.
36. C. Büsing and F. D’Andreagiovanni. **On the adoption of multi-band uncertainty in robust network design.** Proc. of ISMP 2012, the 21st International Symposium on Mathematical Programming, Berlin, Germany, 2012.
37. C. Büsing and F. D’Andreagiovanni. **New results about robust network design under multiband uncertainty.** Proc. of the 11th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA, 2012.
38. F. D’Andreagiovanni. **On developing strong 0–1 formulations for wireless network design.** Proc. of ESF-JSPS Mathematics for Innovation: Large and Complex Systems, Tokyo, Japan, 2012.
39. F. D’Andreagiovanni. **Pure 0–1 programming approaches to wireless network design.** 4OR: A Quarterly Journal of Operations Research, 2012.
40. F. D’Andreagiovanni and M. Grötschel. **Exploiting dominance criteria in the design of survivable multi-layer networks.** Proc. of the 11th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA, 2012.
41. F. D’Andreagiovanni and M. Grötschel. **Improving the efficiency of algorithms for survivable multi-layer network design.** Proc. of High Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi, Vietnam, 2012.
42. F. D’Andreagiovanni, C. Mannino, and A. Sassano. **GUB covers and power-indexed formulations for wireless network design.** Management Science, 2012.
43. F. D’Andreagiovanni, C. Mannino, and A. Sassano. **On the solution of wireless network design problems by cycle deletion.** Proc. of the 11th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA, 2012.
44. F. D’Andreagiovanni, C. Mannino, and A. Sassano. **Solving wireless network design problems by cycle deletion.** Proc. of High Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi, Vietnam, 2012.

45. V. J. Dercksen, R. Egger, H.-C. Hege, and M. Oberlaender. **Synaptic connectivity in anatomically realistic neural networks: modeling and visual analysis.** Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM), pages 17–24, Norrköping, Sweden, 2012.
46. V. J. Dercksen, M. Oberlaender, B. Sakmann, and H.-C. Hege. **Interactive visualization – a key prerequisite for reconstruction of anatomically realistic neural networks.** In L. Linsen, H. Hagen, B. Hamann, and H.-C. Hege (eds.), *Visualization in Medicine and Life Sciences II*, pages 27–44. Springer, Berlin, 2012.
47. P. Deuflhard and S. Zachow. **Mathematische Therapie- und Operationsplanung.** Themenbroschüre 2012 – Gesundheitstandort Berlin-Brandenburg, Forschung und Anwendung in der Medizintechnik und Telemedizin, pages 89–90, 2012.
48. P. Deuflhard, A. Schiela, and M. Weiser. **Mathematical cancer therapy planning in deep regional hyperthermia.** *Acta Numerica*, 21:307–378, 2012.
49. R. Döbbelin, T. Schütt, and A. Reinefeld. **An analysis of SMP memory allocators: MapReduce on large sharedmemory systems.** Proceedings of the 41st International Conference on Parallel Processing Workshops (Fifth International Workshop on Parallel Programming Models and Systems Software for High-End Computing (P2S2)), pages 48–54. IEEE Computer Society, Sept. 2012.
50. U. Dorndorf, S. Droste, and T. Koch. **Using ZIMPL for modeling production planning problems.** In J. Kallrath (ed.), *Algebraic Modeling Systems*, pages 145–158. Springer, 2012.
51. S. Dreßler and T. Steinke. **Energy consumption of CUDA kernels with varying thread topology.** *Computer Science – Research and Development*, pages 1–9, Springer Berlin, Heidelberg, 2012.
52. V. Durmaz, R. Becker, and M. Weber. **How to simulate affinities for host-guest systems lacking binding mode information: Application in the liquid chromatographic separation of hexabromocyclododecane stereoisomers.** *J. Mol. Model.*, 18: 2399–2408, 2012.
53. M. Ehlke, H. Ramm, H. Lamecker, and S. Zachow. **Efficient projection and deformation of volumetric shape and intensity models for accurate simulation of X-ray images.** Eurographics Workshop on Visual Computing for Biomedicine (VCBM) (poster submission), 2012.
54. M. Ehlke, H. Seim, H. Lamecker, X. Yang, M. Heller, and S. Zachow. **Fast and accurate DRRs for X-ray based joint surgery planning.** 12th Annual Meeting of CAOS-International (CAOS), number 293, Seoul, 2012.
55. M. Ehlke, H. Seim, H. Lamecker, X. Yang, and S. Zachow. **Fast generation of virtual X-ray images from deformable shape and intensity models.** Proc. 10th SJTU-TUB Joint Workshop on Data Science and Engineering, Shanghai, 2012.
56. H. Ehrig, U. Golas, A. Habel, L. Lambers, and F. Orejas. **M-adhesive transformation systems with nested application conditions. Part 2: Embedding, critical pairs and local confluence.** *Fundamenta Informaticae*, 118 (1–2): 35–63, 2012.
57. H. Enke, A. Partl, A. Reinefeld, and F. Schintke. **Handling big data in astronomy and astrophysics: Rich structured queries on replicated Cloud data with XtreamFS.** *Datenbank-Spektrum*, Vol. 12, No. 3, pp. 173–181, Springer-Verlag, 2012.
58. K. Fackeldey. **Multiscale methods in time and space.** Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2010, volume 17 of Mathematics in Industry, pages 619–626, 2012.
59. K. Fackeldey, A. Bujotzek, and M. Weber. **A meshless discretization method for Markov state models applied to explicit water peptide folding simulations.** *Meshfree Methods for Partial Differential Equations VI*, volume 89 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pages 141–154. Springer, 2012.
60. K. Fackeldey, M. Klimm, and M. Weber. **A coarse graining method for the dimension reduction of the state space of biomolecules.** *Journal of Mathematical Chemistry*, 5(9):2623–2635, 2012.
61. C. Fasting, C. Schalley, M. Weber, O. Seitz, S. Hecht, B. Kocsch, J. Dervede, C. Graf, E.-W. Knapp, and R. Haag. **Multivalency as a chemical organization and action principle.** *Angew. Chem. Int. Ed.*, 51(42): 10472–10498, 2012.
62. T. Flik and A. Reinefeld. **Rechnerorganisation.** In H. Czichos and M. Hennecke (eds.), *Hütte – Das Ingenieurwissen*, pages J6–J124. Springer-Verlag Berlin, 34 edition, 2012.
63. T. L. Gertzen and M. Grötschel. **Flinders Petrie, the Travelling Salesman Problem, and the Beginning of Mathematical Modeling in Archaeology.** In M. Grötschel (ed.), *Optimization Stories, Extra Volume*, pages 199–210. DOCUMENTA MATHEMATICA, Bielefeld, Aug. 2012.
64. S. Gesing, R. Grunzke, J. Krüger, G. Birkenheuer, M. Wewior, P. Schäfer, B. Schuller, J. Schuster, S. Herres-Pawlis, S. Breuers, A. Balasko, M. Kozlovsky, A. Szikszay Fabri, L. Packschies, P. Kacsuk, D. Blunk, T. Steinke, A. Brinkmann, G. Fels, R. Müller-Pfefferkorn, R. Jäkel, and O. Kohlbacher. **A single sign-on infrastructure for science gateways on a use case for structural bioinformatics.** *Journal of Grid Computing*, 2012.
65. 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. **A science gateway getting ready for serving the international molecular simulation community.** Proceedings of Science, PoS(EGICF12-EMITC2)050, 2012.
66. 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. EGI Community Forum 2012, 2012.

67. A. M. Gleixner, H. Held, W. Huang, and S. Vigerske. **Towards globally optimal operation of water supply networks.** Numerical Algebra, Control and Optimization (NACO), 2(4): 695–711, 2012.

68. A. M. Gleixner, D. Steffy, and K. Wolter. **Improving the accuracy of linear programming solvers with iterative refinement.** In J. van der Hoeven and M. van Hoeij (eds.), Proceedings of the 37th International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC 2012), pages 187–194, Grenoble, France, July 2012.

69. U. Golas. **A general attribution concept for models in M-adhesive transformation systems.** In H. Ehrig, G. Engels, H.-J. Kreowski, and G. Rozenberg (eds.), Proceedings of ICGT 2012, volume 7562 of LNCS, pages 187–202. Springer, Sept. 2012.

70. U. Golas and T. Soboll (eds.). **Proceedings of ACCAT 2012,** Electronic Proceedings in Theoretical Computer Science 93, 2012.

71. U. Golas, L. Lambers, H. Ehrig, and H. Giese. **Towards bridging the gap between formal foundations and current practice for triple graph grammars – Flexible relations between source and target elements.** In H. Ehrig, G. Engels, H.-J. Kreowski, and G. Rozenberg (eds.), Proceedings of ICGT 2012, volume 7562 of LNCS, pages 141–155. Springer, Sept. 2012.

72. 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, Vol. 424, pp. 46–68, 2012.

73. J. Goltz and D. Thiede. **Cloud computing and libraries – A German perspective.** IFLA SET Bulletin, 13(2): 18–19, 2012.

74. J. Goltz, M. Groh, T. Kinstler, K. Kropf, and E. Weiser. **Cycling for libraries 2012 – The Baltic states.** BuB, 64(10): 670, 2012.

75. S. Götschel, M. Weiser, C. Maierhofer, and R. Richter. **Data enhancement for active thermography.** In G. Cardone (ed.), Proceedings of the 11th International Conference on Quantitative InfraRed Thermography, 2012. QIRT-2012-167.

76. S. Götschel, M. Weiser, and A. Schiela. **Solving optimal control problems with the Kaskade 7 finite element toolbox.** In A. Dedner, B. Flemisch, and R. Klöforn (eds.), Advances in DUNE, pages 101–112. Springer, 2012.

77. L. Goubergrits, J. Schaller, U. Kertzsch, N. van den Bruck, K. Pöthkow, C. Petz, H.-C. Hege, and A. Spuler. **Statistical wall shear stress maps of ruptured and unruptured middle cerebral artery aneurysms.** J. R. Soc. Interface, 9(69): 677–688, 2012.

78. M. Grötschel. **Einblicke in die diskrete Mathematik.** DER MATHEMATIK-UNTERRICHT – Angewandte Diskrete Mathematik mit Schülerinnen und Schülern erkunden, Jahrgang 58 (Heft 2): 4–17, Mar. 2012.

79. M. Grötschel and G. Neumann. **10 Jahre TELOTA.** In A. Schmidt (ed.), Jahrbuch 2011, pages 202–215. Akademie-Verlag GmbH, Berlin, 2012.

80. M. Grötschel and Y. Yuan. **Euler, Mei-Ko Kwan, Königsberg, and a Chinese postman.** In M. Grötschel (ed.), Optimization Stories, Extra Volume, pages 43–50. DOCUMENTA MATHEMATICA, Bielefeld, Aug. 2012.

81. R. Grunzke, G. Birkenheuer, D. Blunk, S. Breuers, A. Brinkmann, S. Gesing, S. Herres-Pawlis, O. Kohlbacher, J. Krüger, M. Kruse, R. Müller-Pfefferkorn, P. Schäfer, B. Schuller, T. Steinke, and A. Zink. **A data driven science gateway for computational workflows.** Proceedings of the UNICORE Summit, Dresden, Germany, May 2012.

82. M. Hammerschmidt, D. Lockau, S. Burger, F. Schmidt, C. Schwanke, S. Kirner, S. Calnan, B. Stannowski, and B. Rech. **3D optical modeling of thin-film a-Si/ μ c-Si tandem solar cells with random textured interfaces using**

FEM. Optical Instrumentation for Energy and Environmental Applications. Optical Society of America, 2012.

83. R. Heckel, H. Ehrig, U. Golas, and F. Hermann. **Parallelism and Concurrency of Stochastic Graph Transformations.** In H. Ehrig, G. Engels, H.-J. Kreowski, and G. Rozenberg (eds.), Proceedings of ICGT 2012, volume 7562 of LNCS, pages 96–110. Springer, Sept. 2012.

84. S. Heinz and J. C. Beck. **Reconsidering mixed integer programming and MIP-based hybrids for scheduling.** In N. Beldiceanu, N. Jussien, and E. Pinson (eds.), Integration of AI and OR Techniques in Constraint Programming for Combinatorial Optimization Problems (CPAIOR 2012), volume 7298 of Lectures Notes in Computer Science, pages 211–227. Springer, 2012.

85. S. Heinz, T. Schlechte, R. Stephan, and M. Winkler. **Solving steel mill slab design problems.** Constraints, 17(1): 39–50, 2012. Letter.

86. B. Hiller and T. Vredeveld. **Probabilistic alternatives for competitive analysis.** Computer Science – Research and Development, 27(3):189–196, 2012

87. K. R. Hiremath, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Numerical solution of nonlocal hydrodynamic Drude model for arbitrary shaped nano-plasmonic structures using Nédélec finite elements.** Journal of Computational Physics, 231(17): 5890–5896, 2012.

88. K. C. T. Ho, S. K. Saevarsson, H. Ramm, R. Lieck, S. Zachow, G. B. Sharma, E. L. Rex, S. Amiri, B. C. Y. Wu, A. Leumann, and C. Anglin. **Computed tomography analysis of knee pose and geometry before and after total knee arthroplasty.** Journal of Biomechanics, 45 (13): 2215–21, July 2012.

89. N. D. Hoàng and T. Koch. **Steiner tree packing revisited.** Mathematical Methods of Operations Research, 76: 95–123, 2012.

90. U. Homberg, D. Baum, S. Prohaska, U. Kalbe, and K. J. Witt. **Automatic extraction and analysis of realistic pore structures from μ CT data for pore space characterization of graded soil.**

Proceedings of the 6th International Conference on Scour and Erosion (ICSE-6), pages 66–73, Paris, Frankreich, 2012.

91. M. Kahnt, H. Ramm, H. Lamecker, and S. Zachow. **Feature-preserving, multi-material mesh generation using hierarchical oracles.** In J. Levine, R. Paulsen, and Y. Zhang (eds.), Proc. MICCAI Workshop on Mesh Processing in Medical Image Analysis (MeshMed), volume 7599 of Lecture Notes in Computer Science, pages 101–111, 2012.

92. D. Kainmueller, H. Lamecker, M. O. Heller, B. Weber, H.-C. Hege, and S. Zachow. **Omnidirectional displacements for deformable surfaces.** Medical Image Analysis (in press), 2012.

93. A. Kato, S. Burger, and F. Scholze. **Analytical modeling and 3D finite element simulation of line edge roughness in scatterometry.** Appl. Optics, 51: 6457–6464, 2012.

94. S. Kindermann, F. Schintke, and B. Fritsch. **A collaborative data management infrastructure for climate data analysis.** Geophysical Research Abstracts, volume 14, EGU2012-10569, 2012.

95. C. Klapproth, A. Schiela, and P. Deuflhard. **Fast algorithm for the simulation of human knee joint motion.** In C. Hellmich, M. Hamza, and D. Simsik (eds.), Biomedical Engineering, Proc. BioMed 2012, Innsbruck, Austria. Track 764–176, Special Session: Multi-Scale Biomechanics and Mechanobiology. ACTA Press, 2012.

96. M. Klindt, D. Baum, S. Prohaska, and H.-C. Hege. **iCon.text – a customizable iPad app for kiosk applications in museum exhibitions.** EVA 2012 Berlin, pages 150–155. Gesellschaft zur Förderung angewandter Informatik e. V., Nov. 2012.

97. M. Klindt, S. Prohaska, D. Baum, and H.-C. Hege. **Conveying archaeological contexts to museum visitors: Case study Pergamon exhibition.** In D. Arnold, J. Kaminski, F. Niccolucci, and A. Stork (eds.), VAST12: The 13th International Symposium on Virtual Reality, Archaeology and Intelligent

Cultural Heritage – Short Papers, pages 25–28, Brighton, UK, 2012. Eurographics Association.

98. T. Koch, T. Ralphs, and Y. Shinano. **Could we use a million cores to solve an integer program?** Mathematical Methods of Operations Research, 76: 67–93, 2012.

99. R. Köppen, J. Riedel, M. Proske, S. Drzymala, T. Rasenko, V. Durmaz, M. Weber, and M. Koch. **Photochemical trans-/cis-isomerization and quantification of zeaxanthin in edible oils.** J. Agric. Food Chem., 60:11733–11740, 2012.

100. A. Kratz, C. Auer, M. Stommel, and I. Hotz. **Visualization and analysis of second-order tensors: Moving beyond the symmetric positive-definite case.** Computer Graphics Forum – State of the Art Reports (accepted for publication), 2012.

101. S. Kratzstein, E. Kornaropoulos, R. Ehrig, M. Heller, B. Pöplau, and W. Taylor. **Effective marker placement for functional identification of the centre of rotation at the hip.** Gait & Posture, 36 (3): 482–486, 2012.

102. N. Lindow, D. Baum, A.-N. Bondar, and H.-C. Hege. **Dynamic channels in biomolecular systems: Path analysis and visualization.** Proceedings of IEEE Symposium on Biological Data Visualization (BioVis 2012), pages 99–106, 2012.

103. N. Lindow, D. Baum, and H.-C. Hege. **Perceptually linear parameter variations.** Computer Graphics Forum, 31(2): 535–544, 2012.

104. N. Lindow, D. Baum, and H.-C. Hege. **Interactive rendering of materials and biological structures on atomic and nanoscopic scale.** Computer Graphics Forum, 31(3): 1325–1334, 2012.

105. S. Marbán, R. van der Zwaan, A. Grigoriev, B. Hiller, and T. Vredeveld. **Dynamic pricing problems with elastic demand.** Operations Research Letters, 40(3):175–179, 2012.

106. U. Menne, C. Raack, R. Wessäly, and D. Kharitonov. **Optimal degree of optical circuit switching in IP-over-**

WDM networks. Proceedings of the 16th conference on Optical network design and modeling, ONDM 2012, pages 1–6, Apr. 2012.

107. T. D. Nguyen, D. Kainmueller, H. Lamecker, and S. Zachow. **Automatic bone and tooth detection for CT-based dental implant planning.** Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery, 7, Supplement 1(1), 2012.

108. T. D. Nguyen, H. Lamecker, D. Kainmueller, and S. Zachow. **Automatic detection and classification of teeth in CT-data.** In N. Ayache, H. Delingette, P. Golland, and K. Mori (eds.), Proc. Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention (MICCAI), volume 7510 of Lecture Notes in Computer Science, pages 609–616, 2012.

109. 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 three-dimensional structure of thalamocortical circuits in a column of rat vibrissal cortex.** Cerebral Cortex, 22(10):2375–2391, 2012.

110. S. Orlowski, A. Werner, and R. Wessäly. **Estimating trenching costs in FTTx network planning.** In D. Klatte, H.-J. Lüthi, and K. Schmedders (eds.), Operations Research Proceedings 2011, pages 89–94. Springer Verlag, 2012.

111. K. Peter and A. Reinefeld. **Consistency and fault tolerance for erasure-coded distributed storage systems.** Proceedings of the fifth international workshop on Data-Intensive Distributed Computing, DIDC'12, pages 23–32, New York, NY, USA, 2012. ACM.

112. K. Peter and P. Sobe. **Application of regenerating codes for fault tolerance in distributed storage systems.** 12th Intl. Symposium on Network Computing and Applications (NCA 2012), pages 67–70, Cambridge, USA 2012.

113. J. Petracek, J. Luksch, B. Maes, S. Burger, P. Kwicien, and I. Richter. **Simulation of photonic crystal nanocavities using a bidirectional eigenmode propagation algorithm:**

- a comparative study.** In M. Ferrari, M. Marciniak, G. C. Righini, T. Szoplík, and S. Varas (eds.), *Micro- and nanophotonic materials and devices*, pages 109–112. IFN-CNR, Trento, Italy, 2012.
114. J. Petracek, B. Maes, S. Burger, J. Luksch, P. Kwiecien, and I. Richter. **Simulation of high-Q nanocavities with 1D photonic gap.** *Transparent Optical Networks (ICTON)*, pages 1–4. IEEE, 2012.
115. C. Petz, K. Pöthkow, and H.-C. Hege. **Probabilistic local features in uncertain vector fields with spatial correlation.** *Computer Graphics Forum*, 31(3):1045–1054, 2012.
116. H. Pfister, V. Kaynig, C. P. Botha, S. Bruckner, V. J. Dercksen, H.-C. Hege, and J. B. T. M. Roerdink. **Visualization in connectomics.** Technical report. arXiv:1206.1428, Aug. 2012.
117. T. Pollok, L. Zschiedrich, and F. Schmidt. **Scattering problems in periodic media with local perturbations.** *Scientific Computing in Electrical Engineering SCEE 2010*, pages 69–77, 2012.
118. J. Pomplun, H. Wenzel, S. Burger, L. Zschiedrich, M. Rozova, F. Schmidt, P. Crump, H. Ekhteraei, C. M. Schultz, and G. Erbert. **Thermo-optical simulation of high-power diode lasers.** *Proc. SPIE*, 8255:825510, 2012.
119. M. Poss and C. Raack. **Affine re-course for the robust network design problem: between static and dynamic routing.** *Networks*, (online early view), 2012.
120. K. Pöthkow and H.-C. Hege. **Uncertainty propagation in DT-MRI anisotropy isosurface extraction.** In D. Laidlaw and A. Vilanova (eds.), *New Developments in the Visualization and Processing of Tensor Fields*, *Mathematics and Visualization*, pages 209–225. Springer, Berlin, 2012.
121. H. Ramm and S. Zachow. **Computergestützte Planung für die individuelle Implantatversorgung.** *Health Academy*, 16, 2012.
122. H. Ramm, M. Kahnt, and S. Zachow. **Patientenspezifische Simulationsmodelle für die funktionelle Analyse von künstlichem Gelenkersatz.** *Computer Aided Medical Engineering (CaMe)*, 2012.
123. M. Richter, F. Schlosser, M. Schoth, S. Burger, F. Schmidt, A. Knorr, and S. Mukamel. **Reconstruction of the wave functions of coupled nanoscopic emitters using a coherent optical technique.** *Phys. Rev. B*, 86: 085308, 2012.
124. M. Rozova, J. Pomplun, L. Zschiedrich, F. Schmidt, and S. Burger. **3D finite element simulation of optical modes in VCSELs.** *Proc. SPIE*, 8255: 82550K, 2012.
125. D. Ruprecht, A. Schädle, and F. Schmidt. **Transparent boundary conditions based on the pole condition for timedependent, two-dimensional problems.** *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2012.
126. S. Saevarsson, G. Sharma, S. Montgomery, K. Ho, H. Ramm, R. Lieck, S. Zachow, C. Hutchison, J. Werle, and C. Anglin. **Kinematic comparison between gender specific and traditional femoral implants.** 67th Canadian Orthopaedic Association (COA) Annual Meeting (accepted), 2012.
127. G. Sagnol. **Approximation of a maximum-submodular-coverage problem involving spectral functions, with application to experimental designs.** *Discrete Applied Mathematics*, 161 (1–2): 258–276, 2013.
128. P. Schäfer and M. Höggqvist. **SFA: a symbolic fourier approximation and index for similarity search in high dimensional datasets.** *Proceedings of the 15th International Conference on Extending Database Technology, EDBT '12*, pages 516–527, New York, NY, USA, Mar. 2012. ACM.
129. R. Scheumann, A. Fügenschuh, S. Schenker, I. Vierhaus, R. Borndörfer, and M. Finkbeiner. **Global manufacturing: How to use mathematical optimization methods to transform to sustainable value creation.** *Sustainable Manufacturing – Towards Implementing Sustainable Manufacturing*, *Proc. 10th Global Conference on Sustainable Manufacturing (GCSM 2012)*. Springer Verlag, 2012.
130. T. Schlechte. **Duell an der Weiche.** *OR News*, 46:14–16, Nov. 2012.
131. F. Schlosser, M. Schoth, S. Burger, F. Schmidt, A. Knorr, S. Mukamel, and M. Richter. **Coherent nonlinear spectroscopy with spatiotemporally controlled fields.** *CLEO: QELS-Fundamental Science*, page QF3D.6. Optical Society of America, 2012.
132. F. Schlosser, M. Schoth, K. Hiremath, S. Burger, F. Schmidt, A. Knorr, S. Mukamel, and M. Richter. **Combining nanooptical fields and coherent spectroscopy on systems with delocalized excitons.** *Proc. SPIE*, 8260: 82601V, 2012.
133. T. Schütt, A. Reinefeld, and R. Maier. **MR-Search: Massively Parallel Heuristic Search.** *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 2012.
134. G. Sharma, S. Saevarsson, S. Amiri, S. Montgomery, H. Ramm, D. Lichti, R. Lieck, S. Zachow, and C. Anglin. **Radiological method for measuring patellofemoral tracking and tibiofemoral kinematics before and after total knee replacement.** *Bone and Joint Research*, 1 (10): 263–271, 2012.
135. G. B. Sharma, K. C. Ho, S. K. Saevarsson, H. Ramm, R. Lieck, S. Zachow, and C. Anglin. **Knee pose and geometry pre- and post-total knee arthroplasty using computed tomography.** 2012.
136. G. B. Sharma, S. K. Saevarsson, S. Amiri, S. Montgomery, H. Ramm, D. Lichti, S. Zachow, and C. Anglin. **Sequential-biplane radiography for measuring pre and post total knee arthroplasty kinematics.** 2012.
137. Y. Shinano, T. Achterberg, T. Berthold, S. Heinz, and T. Koch. **ParaSCIP – a parallel extension of SCIP.** In C. Bischof, H.-G. Hegering, W. E. Nagel, and G. Wittum (eds.), *Competence in High Performance Computing 2010*, pages 135–148. Springer, Feb. 2012.

138. T. Soboll and U. Golas. **A local-global model for multiagent systems – Sheaves on the category MAS.** In J. Filipe and A. Fred (eds.), *Proceedings of ICAART 2012*, volume 2, pages 331–334. SciTePress, 2012.
139. C. Stötzel, J. Plöntzke, W. Heuwieser, and S. Röblitz. **Advances in modelling of the bovine estrous cycle: Administration of PGF2alpha.** *Theriogenology*, 78(7): 1415–1428, 2012.
140. S. Szott. **Vom Prototypen zum nachhaltigen Hosting-Service: die Resource Discovery Lösung ALBERT.** *Bibliotheksdienst*, 46(8/9): 683–686, 2012.
141. W. Taylor, A. Fröhlich, F. Buttgerit, R. Ehrig, T. Witaschek, and G. Duda. **Metacarpophalangeal joint stiffness is reduced in patients affected by rheumatoid arthritis after glucocorticoid medication.** In U. G. Kersting, M. M. Morlock, D. Jirova-Enzmann, and K. Dremstrup (eds.), *Proceedings of the ESM-2012*, Aalborg, page 39. Department of Health Science and Technology, Aalborg University, 2012.
142. J. K. Tyminski, R. Popescu, S. Burger, J. Pomplun, L. Zschiedrich, T. Matsuyama, and T. Noda. **Finite element models of lithographic mask topography.** *Proc. SPIE*, 8326:83261B, 2012.
143. F. M. Vos, J. A. Tielbeek, R. E. Naziroglu, Z. Li, P. Schueffler, D. Mahapatra, A. Wiebel, C. Lavini, J. M. Buhmann, H.-C. Hege, J. Stoker, and L. J. van Vliet. **Computational modeling for assessment of IBD: to be or not to be?** 2012 Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), pages 3974–3977, 2012.
144. M. Weber, A. Bujotzek, and R. Haag. **Quantifying the rebinding effect in multivalent chemical ligand-receptor systems.** *J. Chem. Phys.*, 137(5):054111, 2012.
145. M. Weiser and S. Götschel. **State trajectory compression for optimal control with parabolic PDEs.** *SIAM J. Scientific Computing*, 34(1), 2012.
146. F. Wende, F. Cordes, and T. Steinke. **On improving the performance of multi-threaded CUDA applications with concurrent kernel execution by kernel reordering.** *Symposium on Application Accelerators in High Performance Computing (SAAHPC)*, 2012, pp. 74–83, July 2012.
147. A. Wiebel, F. M. Vos, D. Foerster, and H.-C. Hege. **WYSIWYP: What You See Is What You Pick.** *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 18(12): 2236–2244, 2012.
148. H.-D. Yan, P. Lemmens, J. Ahrens, M. Bröring, S. Burger, W. Daum, G. Lilienkamp, S. Korte, A. Lak, and M. Schilling. **High-density array of Au nanowires coupled by plasmon modes.** *Acta Phys. Sin.*, 61(23): 237106, 2012.
149. M. J. Zinser, S. Zachow, and H. F. Sailer. **„Rotation Advancement“ Procedures in patients with obstructive sleep apnea: A 3-dimensional airway analysis of morphological changes.** *International Journal of Oral & Maxillofacial Surgery* (in press), 2012.
150. L. Zschiedrich, H. Greiner, J. Pomplun, M. Hammerschmidt, S. Burger, and F. Schmidt. **FEM simulations of light extraction from nanostructured organic light-emitting diodes.** *Renewable Energy and the Environment Optics and Photonics Congress*, page LT2B.5. Optical Society of America, 2012.

MONOGRAPHIEN

1. F. D'Andreagiovanni. **New perspectives on Wireless Network Design.** *Strong, stable and robust 0–1 models by Power Discretization.* Sapienza Università Editrice, Rom, Italien, 2012.
2. P. Deuffhard and M. Weiser. **Adaptive Numerical Solution of PDEs.** de Gruyter, 2012.
3. M. Grötschel (ed.). **Optimization Stories.** *DOCUMENTA MATHEMATICA*, Journal der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Extra Volume zur ISMP 2012, 2012.
4. C. Raack. **Capacitated Network Design – Multi-Commodity Flow Formulations, Cutting Planes, and Demand Uncertainty.** PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2012.
5. T. Schlechte. **Railway Track Allocation – Models and Algorithms.** PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2012.

DISSERTATIONEN

Freie Universität Berlin

Jens Kasten

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Lagrangian feature extraction in two-dimensional unsteady flows

Betreuer: Ingrid Hotz und Hans-Christian Hege (TU Berlin und ZIB)

Benjamin Kettner

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Detection of spurious modes in resonance mode computations

Betreuer: Frank Schmidt (FU Berlin und ZIB)

Daniel Lockau

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Optical modeling of thin film silicon solar cells with random and periodic light management structures

Betreuer: Frank Schmidt (FU Berlin und ZIB)

Jan Reininghaus

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Computational discrete Morse theory

Betreuer: Ingrid Hotz (TU Berlin und ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Mikael Höggqvist

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Consistent Key-Based Routing in Decentralized and Reconfigurable Data Services

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Jan Stender

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Snapshots in Large-Scale Distributed File Systems

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Technische Universität Berlin

Christian Raack

(Abt. Optimierung)

Capacitated Network Design Multi-Commodity Flow Formulations, Cutting Planes, and Demand Uncertainty

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

EXAMENSARBEITEN

Beuth-Hochschule Berlin

Andreas Weissenbrunner

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Ortsfehlerschätzer für semiimplizite parabolische Löser

Betreuer: Martin Weiser (ZIB)

Freie Universität Berlin

Mascha Berg

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Laufzeitoptimierung der Robusten Perron Cluster Analyse (PCCA+)

Betreuer: Marcus Weber, Susanna Röblitz (ZIB)

Philipp Borgers

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Erweiterung eines verteilten Key-Value-Stores (Riak) um einen räumlichen Index

Betreuer: Florian Schintke (ZIB)

Michael Brückner

(Abt. Optimierung)

Polyedrische Approximation von Punktwolken und ihre Anwendung in der ICE-Abstellungsplanung

Betreuer: Günter Ziegler und Ralf Borndörfer (FU Berlin und ZIB)

Max Kahnt

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Generation of constrained highquality multi-material tetrahedral meshes

Betreuer: Konrad Polthier, Hans Lamecker, Stefan Zachow, Heiko Ramm (FU Berlin und ZIB)

Martin Lange

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Shadow Volumes für dynamische Dreiecksnetze auf CPU und GPU

Betreuer: Konrad Polthier, Alexander Wiebel (FU Berlin und ZIB)

Felix Langner

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Überlastungsschutz mit Anfragepriorisierung für das Internetdateisystem XtreamFS

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Igor Merkulov

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Parameter selection and evaluation for programming of heterogeneous architectures

Betreuer: Alexander Reinefeld, Thomas Steinke (ZIB und HU-Berlin)

Philipp Preis

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Sichtbarkeitsorientiertes Picking in Direct Volume Renderings mit Beleuchtungsmodellen

Betreuer: Konrad Polthier, Alexander Wiebel (FU Berlin und ZIB)

Karl Ruben

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Kugelpackungen in arbiträr geformten Volumina

Betreuer: Knut Reinert, Daniel Baum, Norbert Lindow (FU Berlin und ZIB)

Alexander Surma

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Automatisierte Registrierung von 2D-Daten in 3-dimensionalen Volumen mit Hilfe von ZIBAmira

Betreuer: Günter Rote, Ingrid Hotz, Daniel Baum (FU Berlin und ZIB)

Tobias Tenbusch

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Rendering von Partikeleffekten in einem Deferred Renderer

Betreuer: Konrad Polthier, Alexander Wiebel (FU Berlin und ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Stefan Keidel

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Snapshots in Scalaris – Aufnahme konsistenter Zustände in einer verteilten Hashtabelle

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Maik Lange

(Abt. Parallele und Verteilte Systeme)

Effiziente Reparatur von Repliken in Distributed Hash Tables

Betreuer: Alexander Reinefeld (ZIB und HU-Berlin)

Jana Malinowski

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Ein kontinuierliches Optimierungsverfahren für die Segmentierung medizinischer Bilddaten mit Hilfe von Formmodellen

Betreuer: Michael Hintermüller, Hans Lamecker (HU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Jana Barckmann

(Abt. Optimierung)

Optimizing cable and duct installations in FTTx networks

Betreuer: Martin Grötschel und Axel-Werner (TU Berlin und ZIB)

Nguyen The Duy

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Automatic segmentation for dental operation planning

Betreuer: Stefan Gumhold, Stefan Zachow, Dagmar Kainmüller (TU Berlin und ZIB)

Moritz Ehlke

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Simulating X-ray images from deformable shape and intensity models on the GPU

Betreuer: Bernd Mahr, Stefan Zachow, Heiko Ramm (TU Berlin und ZIB)

Stephanie Jung

(Abt. Optimierung)

Optimierung der Bahnplanung für eine Pick-and-Place-Maschine

Betreuer: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Tina Rockstroh

(Abt. Optimierung)

Die Primal-Dual-Methode: Überblick und Anwendung auf Netzwerk- und Approximationsalgorithmen

Betreuer: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Daniel Uwazie

(Abt. Optimierung)

Approaches to Makespan

Betreuer: Martin Grötschel und Ralf Borndörfer (TU Berlin und ZIB)

Politecnico di Milano, Italien

Sara Orgiu

(Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Automatic liver segmentation in contrast enhanced CT data using 3D free-form deformation based on optimal graph searching

Betreuer: Pietro Cerveri, Hans Lamecker, Dagmar Kainmüller (Politecnico di Milano und ZIB)

Hochschule Zittau/Görlitz

Kristin Meisel

(Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Mathematische Modellierung der Knochenremodellierung

Betreuerin: Susanna Röblitz (ZIB)

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN UND -MITARBEITERINNEN

VORTRÄGE UND GASTAUFENTHALTE

Karsten Andrae

04.07.2012

Classical Hybrid Monte-Carlo Simulation of the Interconversion of Hexabromocyclododecane Stereoisomers

Dynamical Systems and Differential Equations 2012, Orlando, USA

Cornelia Auer

24.02.2012

Glyph- and Texture-Based Visualization of Segmented Tensor Fields

IVAPP 2012, Rom, Italien

Wolfgang Baumann

14.02.2012

HLRN – High Performance Computing in Norddeutschland

Besuch von Studenten der TU Berlin im ZIB (Vortrag und Führung)

07.05.2012

Computer-Simulationen auf Hoch- und Höchstleistungsrechnern

ZEDAT, FU Berlin (Vortrag)

02.06.2012

Supercomputer und Datenroboter

Vortrag und Führungen im Rahmen der „Langen Nacht der Wissenschaften“

13.06.2012

Supercomputing im ZIB

Besuch von Studenten der HTW Berlin im ZIB (Vortrag und Führung)

24.10.2012

Computer-Simulationen auf Hoch- und Höchstleistungsrechnern

ZEDAT/Fachbereich Physik (AG Sebastiani), FU Berlin (Vortrag)

Timo Berthold

23.03.2012

What are Linear Programming and Mixed Integer Programming?

Chuo University, Tokyo, Japan

23.03.2012

Primal Heuristics for Mixed Integer Programs

Chuo University, Tokyo, Japan

15.08.2012

Measuring the Impact of Primal Heuristics

FRICO 2012, Berlin

21.08.2012

Measuring the Impact of Primal Heuristics

ISMP 2012, TU Berlin

17.09.2012

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

Wuhan University, School of Mathematics and Statistics, Wuhan, China

24.09.2012

Measuring the Impact of Primal Heuristics

2nd Sino-German Workshop, Beijing, China

06.11.2012

SCIP: Solving Constraint Integer Programs

TU Berlin

Mark Blome

15.02.2012

Modeling of complex 3D-nano-phonic devices: CAD techniques and grid generation

Fraunhofer-Institut für Angewandte Optik und Feinmechanik, Jena

23.02.2012

Modeling of complex 3D-nano-phonic devices: CAD techniques and grid generation

5th Annual Meeting Photonic Devices, MATHEON-Workshop, ZIB, Berlin

20.04.2012

Optimization of thin film amorphous silicon solar cells using rigorous electromagnetic simulation techniques

Photonics Europe, Brüssel, Belgien

02.06.2012

Vom Regenbogen zur Nano-Optik

Langen Nacht der Wissenschaften, Berlin

03.07.2012

Modeling of complex 3D-nano-phonic devices using computer-aided design techniques

GEOMETRIC, INRIA Sophia Antipolis

14.09.2012

Back-reflector optimization in thinfilm silicon solar cells using 3D finite element simulations

SCEE 2012, Zürich, Schweiz

Ralf Borndörfer

12.01.2012

Überblick Optimierung

IVU UserGroup Optimization, Bayerische Oberlandbahn GmbH, Holzkirchen

12.01.2012

BS-OPT

IVU UserGroup Optimization, Bayerische Oberlandbahn GmbH, Holzkirchen

20.02.2012

Railway Optimization and Integer Programming

Application Lecture, FU Berlin

20.02.2012

Einführung in die Diskrete

Optimierung

Application Lecture, FU Berlin

24.02.2012

Railway Optimization

Workshop, Siemens Verkehrstechnik, ZIB

08.03.2012

Railway Optimization and Integer Programming

5th International Conference on High-Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi

12.03.2011

New Paths in Vehicle and Duty Optimization

User Forum 2012, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

13.03.2012

Service Design in Public Transport

MATHEON Center Days, TU Berlin

13.03.2012

Rolling Stock Roster Planning for Railways

MATHEON Center Days, TU Berlin

12.04.2012

Railway Optimization and Integer Programming

Application Lecture, TU Kassel

02.05.2012

Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung für die DB Fernverkehr AG

Workshop, DB Fernverkehr AG, Frankfurt am Main

24.08.2012

Configuration Models for Solving Integrated Combinatorial Optimization Problems

21st International Symposium on Mathematical Programming, Berlin, TU Berlin

17.09.2012

Railway Optimization and Integer Programming

Seminar, Wuhan University, Wuhan

23.09.2012

Robust Tail Assignment

2nd Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, Chinese Academy of Sciences, Beijing

11.10.2012

Traffic Optimization

Workshop, Lufthansa Systems GmbH, ZIB

22.10.2012

Traffic Optimization

Workshop, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

14.11.2012

LIDO Flight Optimization

Workshop, Lufthansa Systems AG, Frankfurt am Main

15.11.2012

Railway Optimization

Workshop, DB Netz AG, Frankfurt am Main

19.11.2012

Railway Optimization

Workshop, DSB S-Tog, Kopenhagen

29.11.2012

Mathematical Infrastructure Design

Italian-German Workshop on Smart Cities, Berlin

10.12.2012

BahnLab

Eröffnung des Forschungscampus MODAL, ZIB

Alexander Bujotzek

05.06.2012

Quantifying the rebinding effect in multivalent chemical ligand-receptor systems

MESA+/SFB-765 Minisymposium, Berlin

26.–29.09.2012

Quantifying the rebinding effect in multivalent chemical ligand-receptor interactions

Posterpräsentation, EMBO Chemical Biology 2012, Heidelberg

Sven Burger

19.01.2012

JCMsuite – Finite Element Methods for Nanooptics Simulations

(invited talk) Workshop on FEM, IFH, ETH Zürich, Schweiz

15.02.2012

Rigorous 3D Electromagnetic Field Simulations for EUV Mask Metrology

SPIE Advanced Lithography, San Jose, CA, USA

17.02.2012

Finite Element Methods for Nanooptics Simulations

Kavli Nanoscience Institute, CalTech, Pasadena, CA, USA

05.03.2012

Numerical simulations for design and analysis of metamaterials and plasmonic structures

7th Workshop Ellipsometry (WSE), Leipzig

12.06.2012

JCMsuite – Finite Element Methods for Accurate Simulations of Optical Micro- and Nanostructures

Optonet Workshop „Software für die Optik“, Jena

21.06.2012

Numerische Methoden für das Design von mikrostrukturierten optischen Fasern

bayern photonics Workshop „Optische Fasern“, Nürnberg

28.06.2012

Finite Element Methods for Data Analysis in Optical Bidirectional Measurements

EMRP meeting 2012, Espoo, Finnland

03.07.2012

Numerical simulations for design and analysis of nanooptical structures

(invited talk) International Conference on Metamaterials, Jena

29.08.2012

Simulationen der Lichtausbreitung im Nanokosmos

Schülervortrag MATHEON, TU Berlin

16.10.2012

Finite Element Methods for Accurate Simulations of Optical Micro- and Nanostructures

Max-Born-Institut, Berlin

23.11.2012

Finite-Elemente-Methoden für genaue und schnelle Simulationen zum Design integriert-optischer Komponenten

MOSAIC-meeting, Rohde & Schwarz, München

Fabio D'Andreagiovanni

01.03.2012

On developing strong 0–1 formulations for Wireless Network Design

ESF-JSPS Mathematics for Innovation: Large and Complex Systems, Tokyo, Japan

07.03.2012

Improving the Efficiency of Algorithms for Survivable Multi-layer Network Design

High Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi, Vietnam

08.03.2012

Solving Wireless Network Design Problems by Cycle Deletion

High Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi, Vietnam

14.05.2012

Introducing multi-band uncertainty in Robust Optimization

4th ROBUKOM Workshop, München

15.05.2012

Exploiting dominance criteria in the design of survivable multi-layer networks

11th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

16.05.2012

On the solution of Wireless Network Design Problems by Cycle Deletion

11th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

07.06.2012

New results about multi-band uncertainty in Robust Optimization

SEA 2012, Bordeaux, Frankreich

24.08.2012

On the adoption of multi-band uncertainty in robust network design

ISMP 2012, Berlin

05.09.2012

Robust Optimization under Multiband Uncertainty

AIRO 2012, Salerno, Italien

15.11.2012

Robust Optimization under Multiband Uncertainty

5th ROBUKOM Workshop, Berlin

23.11.2012

Robust Optimization under Multiband Uncertainty

Seminar, RWTH Aachen

10.12.2012

A Hybrid Exact-ACO Algorithm for the Joint Scheduling, Power and Cluster Assignment in Cooperative Wireless Networks

BIONETICS 2012, Lugano, Schweiz

13.12.2012

Robust Optimization under Multiband Uncertainty

Seminar, IDSIA, Lugano, Schweiz

Vincent Dercksen

21.03.2012

Light-microscopy-based anatomical reconstruction and visual analysis of cortical neural networks

Gesellschaft für Informatik, Workshop Visual Computing in Medicine and Biology, Berlin

21.04.2012

Light microscopy-based anatomical reconstruction, simulation and analysis of cortical neural networks (invited talk)

2nd International Conference on Neural Field Theory, Reading, Großbritannien

27.09.2012

Synaptic Connectivity in Anatomically Realistic Neural Networks: Modeling and Visual Analysis

Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM), Norrköping, Schweden

Peter Deuffhard

05.03.2012

The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Efficient Simulation in Facial Surgery

Department of Mathematics, Texas A&M University, USA

24.03.2012

The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Efficient Simulation in Facial Surgery

Erstes Großes Ostasiatisches DAAD-Alumnitreffen zur Gründung über-regionaler Fachnetzwerke, Seoul, Korea

09.04.2012

The Smile of the Mathematicians King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal, Saudi Arabien

17.04.2012

Scientific Computing, the Hidden Key Technology

Department of Physics, University of Roma, La Sapienza, Italien

01.05.2012

From molecular dynamics to conformation dynamics in computational drug design

Department of Mathematics, Texas A&M University, Texas, USA

12.06.2012

Alfred K. Louis – Wissenschaftliche Spuren

Verleihung der Ehrendoktorwürde an Alfred Louis, Zentrum für Technomathematik, Universität Bremen

16.08.2012

Adaptive Multigrid Solvers for Eigenvalue Problems: Recent Results and Open Problems

European Multigrid Conference (EMG) 2012, Schloss Schwetzingen

05.09.2012

Mathematical Topics in Virtual Medicine

IMS-IMI Joint Workshop on Mathematics for Industry: Biological and Climatic Prospects, Singapur

10.09.2012

Das Lächeln der Mathematiker

Schülerbesuch des Canisius-Kollegs, ZIB

22.09.2012

Lady Windermere's Dual Fan and the Motion of her Knee

ICNAAM 2012, Kos, Griechenland

24.09.2012

Übersichtsvortrag ZIB

Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats des ZIB, Berlin

24.09.2012

Der ZIB-Bereich „Numerische Mathematik“

Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats des ZIB, Berlin

03.10.2012

Adaptive multilevel finite element methods in virtual medicine

Plenary Talk, International Conference on Applied and Computational Mathematics (ICACM), Ankara, Türkei

05.10.2012

Painters, Murderers, Mathematicians

Cognitive Science Seminar, Computer Engineering Science, Informatics Institute/Department of Cognitive Science, Middle East Technical University (METU), Ankara, Türkei

12.11.2012

Scientific Computing, the Hidden Key Technology

College of Applied Sciences, Beijing University of Technology, China

14.11.2012

The Smile of the Mathematicians

Symposium on Computational Mathematics and Applied Mathematics, Beijing University of Technology, China

15.11.2012

A Non-Standard Extrapolation Method for Dynamical Contact Problems

Academy of Mathematics and System Science, China

15.11.2012

From Molecular Dynamics to Conformation Dynamics for Computational Drug Design

School of Mathematics, Peking University, China

Robert Döbbelin

10. – 13.09.2012

An Analysis of SMP Memory Allocators: MapReduce on Large Shared-Memory Systems

ICPPW 2012 – 41st International Conference on Parallel Processing Workshops, Pittsburgh, USA

Moritz Ehlke

11.01.2012

Simulation of X-ray Attenuation inside Tetrahedral Meshes

MXL project meeting, Leiden, Niederlande

29.03.2012

Fast generation of virtual X-ray images from deformable shape and intensity model

10th SJTU-TUB Joint Workshop on Data Science and Engineering, Shanghai, China

08.06.2012

Simulating X-ray images from deformable shape and intensity models on the GPU

TU Berlin Computer Graphics Colloquium, Berlin

27.09.2012

Efficient projection and deformation of volumetric intensity models for accurate simulation of X-ray images

Poster presentation at EG workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (VCBM), Norrköping, Schweden

16.11.2012

Efficient projection and deformation of volumetric intensity models for accurate simulation of X-ray images

Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboter-assistierte Chirurgie e. V. (CURAC), Düsseldorf

06.12.2012

Efficient projection and deformation of volumetric intensity models for accurate simulation of X-ray images

Poster presentation at BSRT PhD symposium The Show of Regeneration: Easy to see hard to foresee, Berlin

Konstantin Fackeldey

13.02.2012

Exploring the Energy Landscape of Proteins for Docking Simulations

Institut für Mathematik, Universität zu Lübeck

05.05.2012

Mit Mathematik Alzheimer und andere Krankheiten verstehen

Tag der Mathematik, FU Berlin

08.05.2012

Clustermethoden für die modellbasierte Optimierung der Versorgung komplexer Krankheitsbilder

Universitätsklinikum, Mannheim

27.07.2012

Multiscale Simulations for Biomolecules with Quantum-like Updates

ECMI, Lund, Schweden

13.09.2012

Pitfalls in atomistic to continuum coupling simulations

ECCOMAS 2012, Wien, Österreich

12.12.2012

Mit Mathematik Krankheiten verstehen

Käthe-Kollwitz-Schule, Berlin

Barbara Fichtl

22.05.2012

Relaunch der DHM-Online-Datenbank

MAI-Tagung, Leipzig

17.10.2012

Relaunch der DHM-Online-Datenbank
(gemeinsam mit Brigitte Reineke, DHM), Herbsttagung der Fachgruppe Museumsdokumentation, ZIB, Berlin**Armin Fügenschuh**

15.08.2011 – 15.02.2012

Gastaufenthalt

Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia, USA

seit 01.11.2012

Vertretungsprofessur

Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

06.03.2012

Warum spart der Staat Steuern, wenn die Schüler eine halbe Stunde früher aufstehen?

MathInside – Mathematik ist überall, Urania, Berlin

21.05.2012

Mixed-Integer Nonlinear Optimization Problems in Transportation Applications

Bewerbungsvortrag, RWTH Aachen

24.08.2012

Scheduling and Routing of Fly-in Safaris

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

29.10.2012

Gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierungsprobleme in zwei Transportanwendungen

Bewerbungsvortrag, Universität Ulm

Gerald Gamrath

18.01.2012

Aktuelle Entwicklungen in SCIP

SAP Projektworkshop, SAP, Walldorf

19.01.2012

An introduction to SCIP

SAP Projektworkshop, SAP, Walldorf

29.03.2012

Advanced Solver Technology for Supply Chain Management

MATHEON Rent the Center, ZIB, Berlin

05.05.2012

Malen nach Zahlen

Ausstellungsbeitrag, 17. Berliner Tag der Mathematik, FU Berlin

07.05.2012

Entwicklungen in SCIP und Rechen-ergebnisse für die MIP-Instanzen

SAP Projektworkshop, Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen

11.07.2012

The SCIP Optimization Suite 3.0 – It's all in the bag!

25th European Conference on Operational Research (EURO), Vilnius, Litauen

20.08.2012

The SCIP Optimization Suite 3.0 – It's all in the bag!

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), TU Berlin

04.09.2012

Advanced Solver Technology for Supply Chain Management

MATHEON Rent the Center, ZIB, Berlin

09.10.2012

Branching in SCIP

SCIP Workshop 2012, TU Darmstadt, Darmstadt

14.10.2012

ZIMPL 3.3: An Open Source Modelling Language

INFORMS Annual Meeting, Phoenix, USA

15.10.2012

GCG 1.0 – A Generic Branch-Cut-and-Price Solver

INFORMS Annual Meeting, Phoenix, USA

16.10.2012

The SCIP Optimization Suite 3.0 – It's all in the bag!

INFORMS Annual Meeting, Phoenix, USA

16.10.2012

Branching in SCIP

INFORMS Annual Meeting, Phoenix, USA

23.10.2012

Entwicklungen in SCIP und Rechen-ergebnisse für die MIP-Instanzen

SAP Projektworkshop, ZIB, Berlin

26.10.2012

Optimierung in der Produktionsplanung

Schülerbesuch Gymnasium Remigianum, ZIB, Berlin

21.11.2012

Improving Strong Branching by Domain Propagation

Optimization Seminar, ZIB, Berlin

Joanna Geibig

17.11.2012

Data Replication in Wireless Networks

METRIK Evaluierung Workshop, Döllnsee

Ambros Gleixner

23.03.2012

Accurate Linear Programming

1st CREST Workshop on Computational Aspects of Solving Large-Scale Optimization Problems, Chuo University, Tokyo, Japan

21.05.2012

Improving the Accuracy of Linear Programming Solvers with Iterative Refinement

Egerváry Szerminárium, ELTE University, Budapest, Ungarn

25.07.2012

Improving the Accuracy of Linear Programming Solvers with Iterative Refinement

ISSAC 2012, Grenoble, Frankreich

16.08.2012

Rapid optimality-based bound tightening

FRICO 2012, Berlin

20.08.2012

Rapid optimality-based bound tightening

ISMP 2012, Berlin

26.09.2012

Optimization-based Bound Tightening and Lagrangian Variable Bounds

2nd Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China

Sebastian Götschel

21.03.2012

Lossy Compression of State Trajectories

Seminar des SFB „Mathematical Optimization and Applications in Biomedical Sciences“, Universität Graz, Österreich

27.03.2012

Lossy Compression of State Trajectories

GAMM 2012, Darmstadt

02.06.2012

Wie Datenkompression bei Herzkammerflimmern hilft

Lange Nacht der Wissenschaften, ZIB, Berlin

11.06.2012

Data Enhancement for Active Thermography

11th Quantitative InfraRed Thermography, Neapel, Italien

Ulrike Golas

25.04.2012

Interactive Model Synthesis for Scenario Specifications

UPC Barcelona

27.09.2012

A General Attribution Concept for Models in M-adhesive Transformation Systems

ICGT 2012 – International Conference on Graph Transformation, 27.09.2012, Bremen

Julia Goltz

25.01.2012

Cloud Computing and Libraries – A German Perspective

Posterpresentation, 20. BOBCATSSS 2012, Amsterdam

24.05.2012

Baukastensystem für Metadatenmanagement: Mable+ als Werkzeug

101. Dt. Bibliothekartag 2012, Hamburg

04.06.2012

Mein mobiles Leben mit SmartPhone und Tablet PC

(gemeinsam mit Jens Schwidder), 10. KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

14.07.2012

Helping and learning – The project „MUKO wiki“ as an example for a hospital patient's library supported by a nonprofit organization

78. IFLA 2012, Helsinki

30.10.2012

Metadatenmanagement: Mable+ als Werkzeug zur Datenanalyse und -modifikation

Berliner Bibliothekswissenschaftliches Kolloquium (BBK), HU Berlin

Carl Martin Grewe

18.06.2012

Morphological Analysis of Facial Aging Patterns

Dermatologikum Hamburg

13.11.2012

Statistical Shape Analysis – Digital 3D Morphometry

Colloquium, Institute of Biochemistry and Biology, University Potsdam

30.11.2012

Digital 3D Facial Analysis

Merz Pharma GmbH, Frankfurt

Martin Grötschel

06.02.2012

Introduction to the Zuse Institute Berlin

Treffen der Sektion Informationswissenschaften der Leopoldina, ZIB, Berlin

07.03.2012

Combinatorial Optimization in Action

Public Lecture, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

09.03.2012

Improving the Efficiency of Algorithms for Survivable Multi-layer Network Design

HPSC 2012, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

12.03.2012

Industry-driven applications of mathematics in the classroom

MATHEON-Zentrumstage, TU-Berlin

13.03.2012

Integrated planning of multi-layer networks

MATHEON-Zentrumstage, TU-Berlin

25.04.2012

Progress in Integer Programming

International Conference on Frontiers of Mathematics, IMPA, Rio de Janeiro, Brasilien, April 20–25, 2012

03.06.2012

Mathematics, operations research, and modern industry

Pinhas Naor Lecture at the ORSIS 2012 meeting, Kibutz Ma'aleh Ha'Hamisha, Israel

05.06.2012

Optimization of gas networks

Technion, Haifa, Israel

22.06.2012

Mathematical Rail Optimization and Integer Programming

Fachkonferenz „Future Information & Communication Technology“, TU Berlin

09.07.2012

IMU, the Making of ICM'98 & more, Organizing Large Mathematical Conferences: Pleasure or Nightmare?

12. International Congress on Mathematical Education (ICME 2012, 08.–15.07.2012), Seoul, Korea

31.07.2012

Die Einstein Stiftung: Förderung: Wege, Ziele, Erfolge, Pläne

Sitzung des Senats von Berlin, HU Berlin

23.08.2012

Hermann Minkowski and Convexity

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), 19.–24.08.2012, TU Berlin

30.08.2012

Konrad Zuse und das Zuse-Institut Workshop

zur Digitalisierung von Konrad Zuses Nachlass, ZIB, Berlin

24.09.2012

Der ZIB-Bereich „Diskrete Mathematik“

Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats des ZIB, Berlin

27.09.2012

„Das Jüngste Gericht“

Konferenz zur Verabschiedung von Peter Deufflhard, ZIB, Berlin

28.09.2012

Mathematik – Treiber wirtschaftlichen Fortschritts?

VBKI-Festveranstaltung, ESMT, Berlin

23.10.2012

Einführungsreferat zur Podiumsdiskussion: „Open Science – Chancen und Herausforderung der digitalen Wissenschaft“

Jacob-Grimm-Zentrum, HU Berlin

01.11.2012

Modellieren, Simulieren, Optimieren: ein Versuch, Missverständnisse zu klären

Festvortrag anlässlich der Verleihung des Klung-Wilhelmy-Weberbank-Preises der FU Berlin, FU Berlin

02.11.2012

The IMU Secretariat in Berlin

Sitzung des IMU Office Committee, IMUSekretariat, Berlin

20.11.2012

Drei Jahre Berliner Einstein Stiftung

Berliner Wirtschaftsgespräche e. V., Satellite Office, Berlin

30.11.2012

Vertrauen in die/der Wissenschaft

Wissenschaftliche Sitzung der BBAW-Versammlung zum Thema: Vertrauen, BBAW, Berlin

Martin Hammerschmidt

13.09.2012

Modeling of thin-film silicon tandem solar cells with random roughness

Seminar MPI für Physik des Lichts, Erlangen

Hans-Christian Hege

07.02.2012

Visualization & Interaction: Support of New Diagnostic Tools for Bowel Diseases

Vigor++ (Virtual Gastrointestinal Tract) Workshop, London, GB

15.02.2012

Visual Support in Fluid Flow Analysis: State-of-the-Art, Recent Developments and Challenges (invited talk)

Minisymposium on Analysis and Representation of Large Data Sets, Universidad Politécnica de Madrid and Spanish Royal Academy, Spanien

18.02.2012

From Data Visualization to Music Visualization (invited talk)

Retreat „Inspiration Interdisziplinarität“, Universität der Künste in Berlin (UdK) und Technische Universität Berlin (TUB), Sauen

22.02.2012

Datenanalyse und Visualisierung im Bauwesen, Workshop Messen und Überwachen im Bauwesen – eine Zukunftsaufgabe

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin

19.03.2012

Light Microscopy-based Anatomical Reconstruction, Simulation and Analysis of Cortical Neural Networks (invited talk)

Bernstein Center for Computational Neuroscience, Berlin

20.04.2012

Visually Supported Data Analysis (invited talk)

Institute of Photonic Technology, Jena

20.04.2012

Anatomical Reconstruction, Simulation and Analysis of Cortical Neural Networks (invited talk)

Institute of Photonic Technology, Jena

26.04.2012

Interactive Visualization

Annual Review of FP7 Project Vigor++ (Virtual Gastrointestinal Tract), Brussels, Belgium

10.05.2012

Visualisierung von Strukturen in Daten

Celebration of MATHEON's 10th Anniversary, Technische Universität Berlin (TUB)

25.05.2012

Quantification and Visualization of Uncertainties in Spatial and Spatio-Temporal Data (invited talk)

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), CSIC, Madrid, Spanien

03.06.2012

Kugelpackungen, Bienenwaben und Schäume

Lange Nacht der Wissenschaften 2012 Berlin/Potsdam, ZIB, Berlin

31.07.2012

Probabilistic Features in Uncertain Scalar and Vector Fields (invited talk)

Simon Fraser University, Vancouver, Kanada

14.09.2012

Visually Supported Data Analysis: Methods and Applications (invited talk)

DLR, Institute of Planetary Research, Berlin, Germany

22.09.2012

Data Visualization in Flow Analysis: State-of-the-Art and Challenges

(keynote talk)

5th Symposium on Global Flow Instability and Control, Hersonissos, Kreta, Griechenland

15.10.2012

Uncertainty Modeling

Tutorial „Uncertainty and Parameter Space Analysis in Visualization“, IEEE VisWeek 2012, Seattle, WA, USA

02.11.2012

Propagation of Uncertainties: From Diffusion Tensors to Anisotropy Indices and Isosurfaces (invited talk)

Workshop Structural Brain Connectivity: Diffusion Imaging – State of the Art and Beyond, Humboldt-Universität zu Berlin, Germany

Stefan Heinz

23.03.2012

Using SCIP as a branch-and-price framework

Chuo University, Tokyo, Japan

01.06.2012

Reconsidering Mixed Integer Programming and MIP-based Hybrids for Scheduling

CPAIOR 2012, Nantes, Frankreich

Olga Heismann

04.12.2012

The Hypergraph Assignment Problem

Discrete and Combinatorial Optimization Group, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

22.08.2012

The Hypergraph Assignment Problem

21st International Symposium on Mathematical Programming, Berlin

11.07.2012

The Hypergraph Assignment Problem

25th European Conference on Operational Research, Vilnius, Litauen

20.02.2012

The hyperassignment problem and IC/ICE rotation planning

Math Slam, BMS Days, Berlin

Benjamin Hiller

05.03.2012

Advanced online algorithms for real-world elevator control

5th International Conference on High-Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

05.03.2012

From Simulation to Optimization

5th International Conference on High-Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

22.03.2012

Vertragsdatenformat und Anpassungen für die Nominierungsvalidierung

Statusworkshop ForNe-Projekt, HU Berlin

29.03.2012

Mathematical optimization for extension planning of gas transmission networks

International Conference on Applied Mathematical Optimization and Modelling 2012, Paderborn

02.06.2012

Online-Optimierung: Von Aufzügen zum Farbensortieren und wieder zurück

Science Slam am ZIB, Lange Nacht der Wissenschaften 2012

10.07.2012

Verifying booked capacities in gas networks

EURO 2012, Vilnius, Litauen

23.08.2012

Geometrie und Optimierung für den Handlungsreisenden

Tschira-Session, 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

23.08.2012

An automated method for verifying booked capacities in gas networks

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

26.09.2012

Stochastic Dominance and Online Bin Coloring

2. Sino-German Workshop, Beijing

16.10.2012

Buchungsvalidierung als Hypothesentest

Statusworkshop ForNe-Projekt, FAU, Erlangen

Ulrike Homberg

19.–20.01.2012

Gastaufenthalt

Professur Grundbau, Fakultät Bauingenieurwesen, Bauhaus-Universität Weimar

19.01.2012

Describing and Analyzing Particle and Pore Structures of Soil from μ CT Data

Professur Grundbau, Fakultät Bauingenieurwesen, Bauhaus-Universität Weimar

29.08.2012

Automatic Extraction and Analysis of Realistic Pore Structures from μ CT Data for Pore Space Characterization of Graded Soil

6th International Conference on Scour and Erosion, Paris, Frankreich

Jesco Humpola

05.03.2011

Solving Nonconvex MIQCP arising in Gas Network Extension Planning.

High Performance Scientific Computing (HPSC 2012), Hanoi, Vietnam

18.04.2012

Topology Optimisation of Gas Transmission Networks.

Computational Management Science (CMS 2012), London, GB

10.07.2012

Gas Network Topology Optimization.

EURO XXV International Conference (EURO 2012), Vilnius, Litauen

21.08.2012

Topology Optimization for Nonlinear Network Flows.

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

Max Kahnt

17.04.2012

A multi-material FE-meshing tool

FE-mesh generation workshop, ZIB, Berlin

Dagmar Kainmüller

21.03.2012

ODDS – Improving Deformable Surface Meshes through Omnidirectional Displacements and MRFs

Vortrag: Institute of Mathematics and Image Computing (MIC), Universität zu Lübeck

28.06.2012

Automatic Reconstruction Framework for Bones, Nerves, and Teeth in Head CT-Data

Vortrag: Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS), Pisa, Italien

03.10.2012

Automatic Detection and Classification of Teeth in CT-Data

Poster presentation at MICCAI, Nice, Frankreich

Marika Karbstein

21.08.2012

Approximation and Min-Max Results for the Steiner Connectivity Problem

ISMP 2012, Berlin

13.09.2012

A Dire Connection Approach to Integrated Line Planning and Passenger Routing

ATMOS 2012, Ljubljana, Slowenien

Corinna Klapproth

17.02.2012

Fast algorithms for the simulation of human knee joint motion

BioMed 2012, Innsbruck, Österreich

28.02.2012

Efficient numerical algorithms for the simulation of human knee joint motion

Computational Biomechanics, ZIB, Berlin

28.03.2012

Consistency results for a contact-stabilized Newmark method in time and space

GAMM 2012, Darmstadt

Marco Klindt

27.03.2012

iConText – an App for Conveying Archaeological Contexts and Reception Histories of Exhibits to Museum Visitors

Computer Applications and Quantitative Methods in Archaeology (CAA 2012), University of Southampton, UK

23.11.2012

iCon.text – Eine Kioskanwendung zur Vermittlung antiker Kontexte: Konzepte und Ergebnisse

Abschlusskolloquium „Berliner Skulpturennetzwerk“, Berlin

Torsten Klug

17.01.12

Smart Destination-Call Elevator Control Algorithms

Seminar, TU Warschau, Polen

17.01.12

The Freight Train Routing Problem

Seminar, TU Warschau, Polen

28.06.12

Optimale Zugführung im Schienengüterverkehr

Kosmos Verbundtreffen, Chemnitz

23.08.2012

An approach for solving the freight train routing problem

ISMP 2012, Berlin

02.10.2012

Optimierung auf der Schiene bunte Theorie und graue Praxis

Schülerbesuch Albertus-Magnus-Gymnasium Bensberg, ZIB, Berlin

06.12.2012

Optimale Zugführung im Schienengüterverkehr

Kosmos Verbundtreffen, Erlangen

Thorsten Koch

22.08.2012

Any progress one year after MIPLIB 2010?

ISMP 2012, TU Berlin

17.09.2012

From Simulation to Optimization

School of Mathematics and Statistics, Wuhan University, China

22.09.2012

From Simulation to Optimization

2nd Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, Beijing, China

28.09.2012

Solving mixed linear and nonlinear problems using the SCIP Optimization Suite

The 24th RAMP Symposium, Miyagi, Japan

01.10.2012

Could we use a million cores to solve an integer program?

Seminar, Chuo University, Tokio, Japan

06.10.2012

Could we use a million cores to solve an integer program?

Seminar, Kyoto University, Japan

Nico Kruber

05.06.2012

Scalaris: Scalable Web Applications with a Transactional Key-Value Store

Berlin Buzzwords 2012, Berlin

20.11.2012

Scalable Data Models with the Transactional Key-Value Store Scalaris

INGI 2012 Doctoral School Day in Cloud Computing, Louvain-la-Neuve

Hans Lamecker

19.11.2012

Automatic Liver Segmentation

Fraunhofer MeVis, Bremen

03.10.2012

Automatic Detection and Classification of Teeth in CT-Data

Poster presentation at MICCAI, Nice, Frankreich

01.10.2012

Feature-Preserving, Multi-Material Mesh Generation using Hierarchical Oracles

Poster presentation at MICCAI Workshop on Mesh Processing in Medical Image Analysis, Nice, Frankreich

16.06.2012

Analysis of Inter-Individual Anatomical Shape Variations of Joint Structures

Poster presentation at CAOS, Seoul, South Korea

08.05.2012

Patient-Specific Anatomical Models

3rd VPH-noe study group on VPH Toolkit, Barcelona, Spanien

17.04.2012

Using TetGen and TetraGen with ZIB-Amira

FE-mesh generation workshop, ZIB, Berlin

Ralf Lenz

20.08.2012

Optimization of water network operation under uncertainties

International Symposium on Mathematical Programming, Berlin

Monika Lill

04.06.2012

Das „KOBV-Portal Zwei“ kommt

KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

26.06.2012

Von der verteilten Suche zu VuFind – Phase Null

VuFind Workshop, UB Leipzig

Norbert Lindow

06.06.2012

Perceptually Linear Parameter Variations

EuroGraphics 2012, Cagliari, Italien

08.06.2012

Interactive Rendering of Materials and Biological Structures on Atomic and Nanoscopic Scale

EuroVis 2012, Wien, Österreich

15.10.2012

Dynamic Channels in Biomolecular Systems: Path Analysis and Visualization

IEEE VisWeek 2012, Seattle, WA, USA

Stefan Lohrum

22.05.2012

Primo – aber sicher!

101. Dt. Bibliothekartag 2012, Hamburg

24.05.2012

De-Duplizierung – ein Thema auf Wiedervorlage

101. Dt. Bibliothekartag 2012, Hamburg

21.06.2012

Servicequalität in verteilten Umgebungen

Oracle Bibliotheken Summit, Bonn

25.09.2012

Neues aus dem KOBV

SFX Anwendungen in Bibliotheken, Fachhochschule Köln

Lars Lubkoll

19.06.2012

G1-continuous Hermite Mesh Refinement

Posterpräsentation, PDESoft, Münster

29.03.2012

An Optimal Control Problem in Polyconvex Hyperelasticity

GAMM, Darmstadt

23.08.2012

Optimal Control in Implant Shape Design

ISMP 2012, Berlin

03.–07.09.2012

Optimal Control in Implant Shape Design

Summer school „Modeling and Simulation in Soft Tissue Biomechanics: From Structure to Macroscopic Response“, Graz, Österreich

06.11.2012

Optimales Implantatdesign

MathInside Urania, Berlin

Matthias Miltenberger

18.01.2012

Neuerungen und Fortschritte SoPlex/LP

SAP-Projektworkshop, SAP, Walldorf

28.03.2012

Solving large-scale linear programming problems

APMOD 2012, Heinz-Nixdorf-Forum, Paderborn

07.05.2012

Neuerungen und Fortschritte**SoPlex/LP**

SAP-Projektworkshop, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen

23.08.2012

Advances in Linear Programming

ISMP 2012, TU Berlin

06.09.2012

The SCIP Optimization Suite 3.0 – It's all in the bag!

OR 2012, Leibniz Universität Hannover

12.09.2012

Advances in Linear Programming

3. IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimisation, University of Birmingham, Großbritannien

23.10.2012

Verletzungen und Lösungsqualität SCIP/SoPlex und CPLEX

SAP-Projektworkshop, ZIB, Berlin

Anja Müller

17.10.2012

Servicestelle Digitalisierung Berlin – digiS

Herbsttagung der Fachgruppe Museumsdokumentation, ZIB, Berlin

The Duy Nguyen

03.10.2012

Automatic Detection and Classification of Teeth in CT-Data

Poster presentation at MICCAI, Nice, Frankreich

Inken Olthoff

02.10.2012

Sparen durch Batterien – Wie man als Stromgroßkunde Geld sparen kann

Schülerbesuch Albertus-Magnus-Gymnasium Bensberg, ZIB, Berlin

23.10.2012

DESI – Übergreifende Optimierung

DESI Konsortialtreffen, T-City Projektbüro, Friedrichshafen

Wolfgang Peters-Kottig

04.06.2012

Das „KOBV-Portal Zwei“ kommt

KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

Olaf Paetsch

17.09.2012

Vergleich automatischer 3D-Risserkennungsmethoden für die quantitative Analyse der Schadensentwicklung in Betonproben mit Computer-Tomographie

DACH-Jahrestagung, Graz, Österreich

20.09.2012

Automated 3D Crack Detection for Analyzing Damage Processes in Concrete with Computed Tomography

Conference on Industrial Computed Tomography, Wels, Österreich

Frank Pfeuffer

20.08.2012

An extension of the controlled robustness model of Bertsimas and Sim

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

12.09.2012

An extension of the controlled robustness model of Bertsimas and Sim

Optimization Seminar, ZIB, Berlin

23.10.2012

DESI – Übergreifende Optimierung

DESI Konsortialtreffen, T-City Projektbüro, Friedrichshafen

Julia Plöntzke

29.02.–02.03.2012

Mathematical modeling of the female estrous cycle – the cow and the woman

Poster- und Videopräsentation, 45th Annual Conference of Physiology and Pathology of Reproduction, Berlin

Kai Pöthkow

06.06.2012

Probabilistic Local Features in Uncertain Vector Fields with Spatial Correlation

EuroVis 2012, Wien, Österreich

Therese Pollok

03.07.2012

Boundary conditions for scattering problems with periodic exterior domains

8th Workshop on Numerical Methods for Optical Nano Structures, ETH Zürich

24.02.2012

Scattering problems with periodic exterior domains

5th Annual Meeting Photonic Devices, ZIB, Berlin

Steffen Prohaska

21.03.2012

Imaging the Entire Mouse Brain at Cellular Resolution

Spring Workshop Visual Computing in Medicine and Biology, Berlin

Christian Raack

26.06.2012

Capacitated Network Design: Multi-Commodity Flow Formulations, Cutting Planes, and Demand Uncertainty

Technische Universität, Berlin

03.07.2012

Cutset inequalities for robust network design

ENGOPT Conference, Rio de Janeiro, Brasil

06.09.2012

Cutset inequalities for robust network design

COApt workshop, Sabrosa-Douro, Portugal

29.11.2012

Principle Limits: Flexible bitrates and dynamic traffic in future optical networks

Kickoff – SASER project, München

Heiko Ramm

17.04.2012

Introduction to ZIBAmira and Tetra-Gen

FE-mesh generation workshop, ZIB, Berlin

04.07.2012

Using SSIMs for 3D reconstruction from 2D image data

MXL project meeting, Lisbon, Portugal

26.09.2012

From medical image data to finite element meshes – Fast and accurate 3D reconstruction of musculoskeletal anatomy

Conference workshop, EORS 2012, Amsterdam, Niederlande

Alexander Reinefeld

24.10.2012

HLRN: North-German Supercomputing Alliance

2. Sino-German Workshop on „Cloud-based High Performance Computing“; Hasso-Plattner-Institut Potsdam

Markus Reuther

11.07.2012

A Rapid Branching method for the Vehicle Rotation Planning Problem

25th European Conference on Operational Research (EURO 2012), Vilnius, Litauen

23.07.2012

Vehicle Rotation Planning for Intercity Railways

12th International Conference on Advanced Systems for Public Transport (CASPT12), Santiago, Chile

Susanna Röblitz

27.09.2012

From Molecular Simulations to Physiology: The Role of Mathematics in Estrogen Modelling

Mathematics in Our Changing World – How visions shape reality, Berlin

Maria Rozova

24.01.2012

Numerical method for precise simulation of optical modes in VCSELs

SPIE Photonics West, San Francisco

20.04.2012

3D finite element simulation of optical modes in VCSELs

SFB787 School of Nanophotonics, Doktorandenseminar

Beate Rusch

25.01.2012

Struktur und Aufgaben des KOBV

Referendarkolloquium des KOBV, ZIB, Berlin

04.06.2012

Ein Blick in die Glaskugel – Verbünde heute und übermorgen

KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

Guillaume Sagnol

08.02.2012

Algorithmic aspects of large scale optimal experimental design

invited talk at the ERGO seminar, University of Edinburgh, Great Britain

26.05.2012

A Stackelberg game to optimize the distribution of controls in transportation networks

3rd International conference on Game Theory for Networks (GAMENETS 2012), Vancouver, Canada

23.07.2012

PICOS: A python interface to conic optimization solvers

ISMP 2012, TU Berlin

Patrick Schäfer

29.03.2012

SFA: a symbolic fourier approximation and index for similarity search in high dimensional datasets

EDBT 2012, Berlin

Olga Scharkoi

25.07.2012

Computational Investigation of Monohydroxylation by Cytochrome P450

ECMI 2012, Lund, Schweden

12.09.2012

Computationally aided design of opioid analgesics selectively interacting with opioid receptors in acidic injured tissue

Posterpräsentation, Molecular Interactions 2012, Berlin

Sebastian Schenker

26.10.2012

About an implementation of a 3-objective linear programming solver

Seminar, University of Coimbra

13.12.2012

About an implementation of a 3-objective linear programming solver

Seminar, University of Nantes

Florian Schintke

14.02.2012

Aspekte der Langzeitarchivierung

BBAW, Berlin

02.06.2012

Neue Herausforderungen der Supercomputer-Programmierung

Lange Nacht der Wissenschaften, ZIB, Berlin

06.07.2012

Replikation und Konsistenz im Cloud-Dateisystem XtreamFS

Seminar Betriebssysteme, H. Härtig, TU Dresden

Thomas Schlechte

17.01.2012

Binpacking by SCIP

Seminar, TU Warschau, Polen

18.01.2012

Railway Track Allocation – Simulation, Aggregation, and Optimization

Seminar, TU Warschau, Polen

24.02.2012

Railway Track Allocation – Trassenallokation im Eisenbahnwesen

Meeting mit Siemens Rail Automation, ZIB, Berlin

20.08.2012

Recent Developments in Railway Track Allocation

ISMP 2012, TU Berlin

06.09.2012

Railway Track Allocation – Simulation, Aggregation, and Optimization

SOR 2012, Hannover

26.09.2012

Recent Developments in Railway Track Allocation

Optimization Seminar, ZIB, Berlin

Frank Schmidt

10.03.2012

D23: Design of Photonic Devices and Materials

MATHEON Center Days, TU Berlin

20.03.2012

Innovation area optical technologies

ECMath Berlin

04.09.2012

Computational Nanooptics at ZIB

Helmholtz-Zentrum Berlin

23.10.2012

Entwicklung der Reduced-Basis-Method

Zeiss AG, Jena

Robert Schwarz

23.08.2012

Gas Network Design with Integrated Optimization of Topology and Dimensioning

ISMP 2012, Berlin

07.09.2012

Extending Gas Transmission Networks
OR 2012, Hannover

Jonas Schweiger

08.02.2012

Multi-Scenario Topology Optimization
Optimierungsseminar, ZIB

22.03.2012

Multi-Szenario-Topologieplanung
ForNe Statusworkshop, HU Berlin

08.06.2012

Mathematical Programming for Gas Network Operation and Extension
5th Nordic Optimization Symposium, NTNU, Trondheim, Norwegen

04.07.2012

Gas Network Topology Extension for Multiple Scenarios
STOPROG-2012, Nida, Litauen

10.07.2012

Gas Network Topology Extension for Multiple Scenarios
EURO, Vilnius, Litauen

21.08.2012

Multi-Scenario Topology Optimization in Gas Networks
ISMP 2012, Berlin

09.10.2012

Multi-Scenario Topology Optimization in Gas Networks
SCIP Workshop 2012, Darmstadt

Jens Schwidder

04.06.2012

Mein mobiles Leben mit SmartPhone und Tablet PC
10. KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

Yuji Shinano

24.08.2012

ParaSCIP and FiberSCIP – Parallel extensions of SCIP
ISMP 2012, TU Berlin

Kathrin Sobe

19.06.2012

Consistency and fault tolerance for erasure-coded data in distributed storage systems
DIDC 2012, Delft

Thomas Steinke

11.07.2012

On Improving the Performance of Multi-threaded CUDA Applications with Concurrent Kernel Execution by Kernel Reordering
SAAHPC, Argonne National Lab

13.11.2012

Classroom Experiences at Zuse Institute Berlin
BOF Session „Parallel and Accelerated Computing Experiences for Successful Industry Careers in High-Performance Computing“, SC'12, Salt Lake City

Claudia Stötzel

07.08. – 10.08.2012

Modeling of endocrinological networks
Posterpräsentation, SIAM Conference on the Life Sciences, San Diego, USA

Elmar Swarat

20.04.2012

Optimization of Toll Enforcements on Motorways
3rd Student Conference on Operational Research – SCOR 2012, Nottingham, UK

24.04.2012

Optimization Methods for Railway Planning Problems
21. railML.org-Treffen, Dresden

22.08.2012

Modeling and Solving a Toll Enforcement Problem
21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), Berlin

15.10.2012

Toll Enforcement Planning by Integer Programming
Informs Annual Meeting 2012, Phoenix, AZ, USA

05.12.2012

Modeling and Solving a Toll Enforcement Problem
ZIB – Optimierungsseminar, Berlin

Sascha Szott

24.05.2012

Das Discoverysystem ALBERT: Ein Baustein auf dem Weg zur Realisierung des Library-as-a-Service-Konzepts
Posterpräsentation, 101. Dt. Bibliothekartag Hamburg

Doreen Thiede

25.01.2012

Cloud Computing and Libraries – A German Perspective
Posterpräsentation, 20. BOBCATSSS 2012, Amsterdam

28.03.2012

Entwicklung am Beispiel von OPUS
Referendarkolloquium des KOBV, ZIB, Berlin

04.06.2012

OPUS wird erwachsen
10. KOBV-Forum 2012, ZIB, Berlin

14.08.2012

Helping and learning – The project MUKOWiki as an example for a hospital patient's library supported by a non-profit organization
78. IFLA 2012, Helsinki

Ingmar Vierhaus

30.09.2012

System Dynamics and Mixed Integer Nonlinear Optimization
MATHEON/BMS Young Researchers Weekend, Blossin

Marcus Weber

23.01.2012

Simulation von Ligand-Rezeptor-Bindungsvorgängen – ist die Kinetik noch zu retten?
Workshop am Fraunhofer-Institut IPK, Berlin

23.04.2012

In-Silico-Toxikologie von Transformationsprodukten
DWA-Workshop, Koblenz

10.05.2012

Biology – too complex?
Deutsche Biotechnologietage 2012, Frankfurt (Main)

20.06.2012

Compressive Sensing in Drug Discovery
SIAM Appl. Lin. Alg., Valencia, Spanien

25.07.2012

In-Silico Methods for Biomolecular Drug Design
ECMI 2012, Lund, Schweden

18.10.2012

Rebinding Events and Negative Reaction Rates
Internationales Symposium SFB-765, Berlin

Martin Weiser

15.02.2012

Kompression – die Mathematik hinter JPG und MP3Tag der Naturwissenschaften,
Kopernikus-Gymnasium Blankenfelde

06.03.2012

Goal-oriented error estimation for nonlinear optimal control problems5th Conference on High Performance
Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

08.03.2012

Lossy Compression of State Trajectories5th Conference on High Performance
Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

29.03.2012

Cardiac Simulation – from cellular automata to PDEsBesuch dänischer Studenten, ZIB,
Berlin

13.06.2012

Mathematik in der Therapieplanung: Hyperthermie

Besuch der Lenné-Schule, ZIB, Berlin

20.06.2012

Delayed Residual Compensation for Bidomain Equations21st International Conference on
Domain Decomposition Methods,
Rennes, Frankreich

03.07.2012

Goal-oriented error estimation for nonlinear optimal control problems

WIAS, Berlin

03.08.2012

Hierarchical Error Estimators in Kaskade 7 – Implementation and Application to Optimal Control ProblemsComputational Methods in Applied
Mathematics 5, Berlin

23.08.2012

Goal-oriented error estimation for nonlinear optimal control problems21st International Symposium on
Mathematical Programming
(ISMP 2012), Berlin

04.09.2012

Cardiac Simulation – from cellular automata to PDEsBesuch dänischer Studenten, ZIB,
Berlin

12.09.2012

Optimal control for implant shape design

ECCOMAS 2012, Wien, Österreich

26.10.2012

Von flimmernden Herzen und zellulären AutomatenBesuch des Gymnasiums Remigia-
num, ZIB, Berlin

06.11.2012

Wer traut noch dem Computer?MATHEON series MathInside, Urania
Berlin**Axel Werner**

18.01.2012

DESI

Telecom day, ZIB

11.06.2012

Mathematical Optimization in TelecommunicationsBesuch von Studenten der HTW Berlin,
ZIB

13.06.2012

Schneller Surfen – Optimierung von TelekommunikationsnetzenBesuch von Schülern der Lenné-Schule
Potsdam, ZIB

09.07.2012

Optimizing energy consumption of telecommunication networks

EURO XXV, Vilnius (Litauen)

05.09.2012

Minimization of energy consumption in IP-over-WDM networks

OR 2012, Hannover

10.09.2012

Schneller Surfen mit Geometrie – Optimierung von TelekommunikationsnetzenSchülerbesuch des Canisius-Kollegs
Berlin, ZIB

13.11.2012

DESI – Optimierungsmodelle zur Berechnung von Energieeinsparpotenzialen im FestnetzIT2Green Fachgruppentreffen, HHI,
Berlin**Alexander Wiebel**

17.08.2012

Sichtbarkeitsorientierte 2D-Auswahl von Strukturen in 3D-VolumendarstellungenBSV-Seminar (Universität Leipzig),
Boží Dar, Tschechische Republik

11.10.2012

Visibility-Oriented Picking in Direct Volumetric RenderingsComputer Science Department Collo-
quium, University of California, Davis,
USA

17.12.2012

WYSIWYP: What You See Is What You PickIEEE Scientific Visualization 2012,
Seattle, USA**Kati Wolter**

09.02.2012

Exact Integer Programming

Gastvorlesung ADM III, TU Berlin

04.07.2012

Exact Integer ProgrammingAnnual meeting DFG Priority Program
„Algorithm Engineering“, Goethe-
Universität Frankfurt am Main

22.08.2012

An Exact Rational Mixed-Integer Programming Solver

ISMP 2012, TU Berlin

24.09.2012

Exact Integer ProgrammingSitzung des Wissenschaftlichen
Beirates des ZIB, Berlin**Stefan Zachow**

13.03.2012

Facial Surgery PlanningVortrag: 13th Winter Meeting of the
EuropeanAcademy of Facial Plastic Surgery
(EAFPS), Galtür, Österreich

27.03.2012

Using SSIMs for 3D Anatomy Reconstruction from 2D Image DataMXL project meeting, Brussels, Bel-
gien

31.03.2012

Facial Surgery Planning: An Engineer's ViewEingeladener Vortrag: 2nd Int. Symposi-
um on New Technologies for Diagno-
sis, Planning & Treatments in Maxillo-
facial Surgery (3DBO), Bologna, Italien

04.07.2012

3D Anatomy Reconstruction from 2D X-Ray Images

MXL project meeting, Lisbon, Portugal

15.06.2012

Fast Computation of Virtual Radio-graphs for 3D Surgery Planning based on X-RayVortrag: 12th Annual meeting of the
Int. Society for Computer Assisted
Orthopaedic Surgery (CAOS), Seoul,
Südkorea

09.11.2012

Three-dimensional morphometry. Building an objective for surgical reconstruction of cranial deformitiesEingeladener Vortrag: Culture Meets
Surgery. Images, Models, and Inter-
pretations of the Human Skull, 1st
Annual Conference of ZfL, Berlin

VORLESUNGEN UND SEMINARE

**Wolfgang Baumann: Jacobs
University Bremen**

[WS 2011/12](#) Parallel programming with MPI and OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs gemeinsam mit H. Stüben)

Wolfgang Baumann: TU Berlin

[WS 2011/12](#) Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP (Lehrveranstaltung und Kurs gemeinsam mit H. Stüben)

Ralf Borndörfer: TU Berlin

[WS 2011/12](#) Computational Integer Programming (VL 4 SWS, mit T. Koch)
[SS 2012](#) Mathematics of Infrastructure Planning (VL 4 SWS, mit M. Grötschel)

**Ralf Borndörfer: Vietnam Academy
of Science and Technology, Hanoi**

[WS 2011/12](#) Mathematical Optimization and Public Transportation (Blockkurs 6+6 S)

Sven Burger: TU Berlin

[WS 2011/12](#) Computational Nanooptics (VL 2 SWS)
[WS 2012/13](#) Methoden zur Berechnung der Eigenschaften von VCSELn und verwandter Resonatoren (VL 2 SWS)

Peter Deuffhard: FU Berlin

[WS 2011/12](#), [SS 2012](#) Oberseminar Scientific Computing (Mitveranstalter: C.Carstensen, H.Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB), R. 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))
[WS 2011/12](#) Numerische Grundlagen der Systembiologie (VL 4 SWS mit S. Röblitz, T. Dierkes, C. Stötzel)

Konstantin Fackeldey: FU Berlin

[SS 2012](#) Analysis II (lehramtsbezogen) (VL 4 SWS, mit M. Weiser)
[SS 2012](#) Fortgeschrittene Methoden in der Simulation von Biomolekülen (SE, mit B. Schmidt)
[WS 2012/13](#) Simulation von Biomolekülen (VL 2 SWS, mit B. Schmidt, M. Weber)

**Armin Fügenschuh: FAU Erlangen-
Nürnberg**

[WS 2012/13](#) Kombinatorische Optimierung (VL 4 SWS)

**S. Gottwald, Th. Klein, G. Maiwald:
FU Berlin**

[WS 2011/12](#) Algorithmen und Analyse auf bibliographischen Daten (Praktikum)

Martin Grötschel: TU Berlin

[WS 2011/12](#) Seminar: Proof Techniques in Polyhedral Combinatorics (Blockseminar, gemeinsam mit Annie Raymond (Berlin Mathematical School))
[SS 2012](#) Mathematics of Infrastructure Planning (ADM III) (Vorlesung gemeinsam mit Ralf Borndörfer)
[WS 2012/13](#) Einführung in die Lineare und Kombinatorische Optimierung (Vorlesung gemeinsam mit Benjamin Hiller)

**Hans-Christian Hege: Mediadesign
Hochschule für Design und Informatik**

[SS 2012](#) 3D Simulation/ Echtzeitvisualisierung (Vorlesung (Blockkurs))

**Olga Heismann: Multinationale Akademie
Torgelow**

[01.08.2012 – 18.08.2012](#) Kombinatorische Optimierung (zweieinhalbwöchiger SchülerAkademie-Kurs)

**Thoralf Klein, Gunar Maiwald: FU
Berlin**

[WS 2012/13](#) Text-Mining-Toolbox: Verfahren und Werkzeuge zur Textanalyse (Praktikum)

Olaf Paetsch: Freie Universität Berlin

[31.07.–01.08.2012](#) Einführung in die digitale Bildverarbeitung (Sommeruni)
[02.–03.08.2012](#) Einführung in die Computergrafik (Sommeruni)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

[SS 2012](#) Fehlertolerante Codes für parallele Speichersysteme (Seminar)
[SS 2012](#) NoSQL-Datenbanken (Seminar)
[SS 2012](#) Forschungsseminar Parallele und Verteilte Systeme (Seminar)
[WS 2012/13](#) Architektur paralleler und verteilter Systeme (Vorlesung und Übungen, gemeinsam mit Florian Schintke)
[WS 2012/13](#) Forschungsseminar Parallele und Verteilte Systeme (Seminar)

Susanna Röblitz: FU Berlin

[WS 2011/12](#) Numerische Grundlagen der Systembiologie (VL 4 SWS, mit P. Deuffhard, T. Dierkes, C. Stötzel)

[WS 2012/13](#) Numerik (VL 2 SWS, mit T. Dierkes, C. Stötzel)

Frank Schmidt: FU Berlin

[WS 2012/13](#) Computational Photonics (VL 2 SWS)

Marcus Weber: FU Berlin

[SS 2012](#) Lineare Algebra I (lehramtsbezogen) (VL 4 SWS, mit A. Caiazzo)
[WS 2012/13](#) Trans-/Inter-/Multidisziplinäres Arbeiten (SE 2 SWS)
[WS 2012/13](#) Simulation von Biomolekülen (VL 2 SWS, mit K. Fackeldey, B. Schmidt)

Martin Weiser: FU Berlin

[WS 2011/12](#) Analysis I (lehramtsbezogen) (VL 4 SWS)
[SS 2012](#) Analysis II (lehramtsbezogen) (VL 4 SWS, mit K. Fackeldey)
[WS 2012/13](#) Lineare Algebra I (VL 4 SWS)

**Alexander Wiebel: Freie Universität
Berlin**

[WS 2012/13](#) Scientific Visualization (Vorlesung)

**MITVERANSTALTER AUSWÄRTIGER
TAGUNGEN**

Ralf Borndörfer

[28.–30.03.2012](#)

PC International Conference on Applied Mathematical Optimization and Modelling (APMOD 1012), U Paderborn

[20.–24.08.2012](#)

OC 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), TU Berlin

Wolfgang Dalitz

[17.–20.09.2012](#)

Minisymposium „Information und Kommunikation in der Mathematik“ im Rahmen der DMV Tagung in Saarbrücken

Armin Fügenschuh

[20.–24.08.2012](#)

OC 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), TU Berlin

[23.08.2012](#)

Organisation des KlausTschira Workshops im Rahmen der ISMP 2012 gemeinsam mit Martin Skutella, TU Berlin

Ulrike Golas

01.04.2012

7th ACCAT Workshop (ACCAT '12) on Applied and Computational Category Theory im Rahmen der ETAPS, Tallinn, Estland

Martin Grötschel

05.–09.03.2012

5th International Conference on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam

12.–14.03.2012

MATHEON-Zentrumstage, TU Berlin

22.–23.04.2012

IMU EC Meeting, Rio de Janeiro, Brasilien

09.–11.07.2012

Vorbereitungssitzung für ICM'2014 Seoul, Republik Korea

19.–24.08.2012

21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), TU Berlin

24.08.2012

Empfang anlässlich des 90. Geburtstages von Egon Balas und des Erscheinens seines Buches „The Will to Freedom“ in deutscher Sprache TU Berlin

Hans-Christian Hege

21.03.2012

GI Fachgruppen-Workshop Visual Computing in Medicine and Biology Berlin, Deutschland

05.–08.06.2012

14th Annual Eurographics Symposium on Data Visualization – EuroVis 2012 (Member of Program Committee) Wien, Österreich

26.–28.06.2012

20th International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2012 – WSCG 2012 (Member of Program Committee) Pilsen, Tschechische Republik

27.–28.09.2012

Eurographics Workshop on Visual Computing in Biology and Medicine – VCBM 2012 (Member of Program Committee), Norrköping, Schweden

14.–15.10.2012

2nd IEEE Symposium on Biological Data Visualization – BioVis 2012 (Member of Program Committee), Seattle, WA, USA

14.–19.10.2012

IEEE Visualization Conference – Vis 2012 (Member of SciVis Program Committee) Seattle, WA, USA

12.11.2012

Ultrascale Visualization Workshop (Member of Program Committee)

Salt Lake City, UT, USA

15.11.2012

Karl-Heinz-Höhne-Award, 11. Jahrestagung für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie – CURAC 2012 (Member of Program Committee) Düsseldorf

Ulrike Homberg

12.12.2012

ZIBAmira Workshop für Mitarbeiter der BAM, Berlin

Thorsten Koch

22.09.–27.09.2012

The 2nd Sino-German Workshop on Optimization, Modeling, Methods and Applications in Industry and Management, Beijing, China

20.–24.08.2012

OC 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), TU Berlin

Olaf Paetsch

12.12.2012

ZIBAmira Workshop für Mitarbeiter der BAM, Berlin, Deutschland

Steffen Prohaska

27.–28.09.2012

Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (Member of Program Committee), Norrköping, Schweden

12.–14.11.2012

VMV – Workshop on Vision, Modeling & Visualization (Member of Program Committee), Magdeburg

Heiko Ramm

17.–18.04.2012

MXL Meshing Workshop, Berlin

Susanna Röblitz

08.11.2012

Minisymposium „Systems Biology and its Modelling Schemes“ im Rahmen der Tagung Brazilian-German Frontiers of Science and Technology Symposium, Brasília, Brasilien

Marcus Weber

23.–24.04.2012

DWA-Fortbildungstagung für Wasserchemiker, Koblenz

Alexander Wiebel

27.–28.09.2012

Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (Member of Program Committee) Norrköping, Schweden

17.09.2012

Workshop GI Informatik 2012 – Trends und aktuelle Entwicklungen für die computerassistierte Neurochirurgie Braunschweig

14.–15.10.2012

2nd IEEE Symposium on Biological Data Visualization – BioVis 2012 (Member of Program Committee) Seattle, WA, USA

Stefan Zachow

17.–18.04.2012

MXL Meshing Workshop, Berlin

27.–28.09.2012

Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine (Member of Program Committee) Norrköping, Schweden

15.11.2012

11. Jahrestagung für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie – CURAC 2012 (Member of Program Committee) Düsseldorf

15.11.2012

Karl-Heinz-Höhne-Award, 11. Jahrestagung für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie – CURAC 2012 (Member of Program Committee) Düsseldorf

16.11.2012

GI Fachgruppen-Workshop Visual Computing for Biology and Medicine Düsseldorf

05.10.2012

MICCAI Workshop on Clinical Image-based Procedures: From Planning to Intervention (CLIP 2012) (Member of Program Committee) Nice, Frankreich

TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

GASTVORTRÄGE

05.01.2012

Radu Ioan Bot

(Technische Universität Chemnitz)

A Fenchel duality-based approach for solving optimization problems arising in supervised learning

25.01.2012

Chamakuri Nagaiah

(University of Graz)

Boundary control of Bidomain equation

22.02.2012

David J. Norris

(ETH Zürich)

Thermal Plasmonics as a Route to Photovoltaics?

22.02.2012

Harald Giessen

(Universität Stuttgart)

Complex 2D and 3D plasmonic nanostructures

22.02.2012

Stefano Selleri

(Università degli Studi di Parma, Italien)

Photonic crystal fiber numerical design for fiber lasers used in photovoltaics scribing

22.02.2012

Bernd Kleemann

(Carl Zeiss AG, Oberkochen)

Integral equation method for photonics applications in conical diffraction

27.02.2012

Horst Nackenhorst

(Leibniz Universität Hannover)

Computational biomechanics of bones – state of the art and recent developments

27.02.2012

Rolf Krause

(Università della Svizzera Italiana, Lugano)

A non-linear biphasic model for periodontal ligament: modeling and simulation

27.02.2012

Ulrich Simon

(Ulmer Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen)

Simulating bone regenerative processes

28.02.2012

Wolfgang Ehlers

(Universität Stuttgart)

Towards the overall human – computational biomechanics proceeding from multi-component and multi-physical tissue properties

28.02.2012

Christian Hellmich

(Technische Universität Wien, Österreich)

Bone structure and strength: an integrative physio-chemo-mechanical approach with links to biology and medicine

28.02.2012

Mirjam Walloth

(Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn)

Adaptive numerical simulation of contact problems. Resolving local effects at the contact boundary in space and time

02.04.2012

Bernd Bickel

(Disney Research Zürich, Schweiz)

Human Faces – From Reality to Reality

11.04.2012

Daniluk Pawel

(Warsaw University, Polen)

Computational complexity and an approach based on the Motzkin-Strauss theorem

11.04.2012

Maciek Dzizubinski

(Warsaw University, Polen)

Detection of local states and causality analysis

07.05.2012

Hans-Christian von Herrmann; Kohei Suzuki

(TU Berlin)

Weißt du, wieviel Sternlein stehen? – Zum Verhältnis von Beobachtung und Darstellung im Planetarium

11.06.2012

Olga Sorkine

(ETH Zürich, Schweiz)

Fast Shape Deformation using Skinning

25.06.2012

Eric Lengyel

(Terathon Software, Roseville, CA, USA)

The Return of Forgotten Mathematics in Computer Graphics

06.08.2012

Guoyan Zheng

(Universität Bern, Schweiz)

3D Personalized Reconstruction of External Shape and Internal Intensity Distribution from X-ray Images: Statistical Model-based Solutions

11.09.2012

Domenico Salvagnin

(Università degli Studi di Padova, Italien)

Randomness and tree search

28.09.2012

Rainer Michalzik

(Universität Ulm)

Vertikallaserdioden (VCSEL): Status und Anwendungen

15.11.2012

Fabrizio Grandoni

(IDSIA Lugano, Lugano, Schweiz)

New Approaches to Network Design

16.11.2012

Dominic Schupke

(Nokia Siemens Networks)

Delay Performance of Resilient Cloud Services over Networks

GASTAUFENTHALTE

Radu Ioan Bot

(Technische Universität Chemnitz)

05.01.2012

Dany Pascal Moualeu

(University of Younde I, Kamerun)

09.01.–31.12.2012

Chamakuri Nagaiah

(Universität Graz, Österreich)

23.–27.01.2012

Falco Schmidt

(Universitätsklinikum Ulm)
23.–24.02.2012

Bernd Lapatki

(Universität Ulm)
23.–24.02.2012

Grigorios Pavliotis

(Imperial College London, UK)
01.03.–31.08.2012

Bernd Bickel

(Disney Research Zürich, Schweiz)
02.04.2012

Felipe Serrano Mussalem

(Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile)
10.–30.04.2012

Xin Liu

(Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)
20.–27.04.2012

Burgu Tunga

(Istanbul Technical University, Türkei)
14.05.–15.11.2012

Olga Sorkine

(ETH Zürich, Schweiz)
03.06.–31.07.2012

Domenico Salvagnin

(Universität Padua, Italien)
18.06.–13.09.2012

Erich Lengyel

(Terathon Software, Roseville, CA, USA)
25.06.2012

Amir Niknejad

(The College of Saint Vincent, New York, USA)
02.07.–20.08.2012

Stefan Jacobs

(Fachhochschule Flensburg)
02.07.–30.09.2012

Junwhan Lee

(Advanced Nano Device Laboratory, Pohang, Korea)
06.–22.07.2012

Stefan Weltge

(Universität Magdeburg)
16.–20.07.2012

Pietro Belotti

(Clemson University, Clemson, South Carolina, USA)
18.07.–28.08.2012

Akiyoshi Shioura

(Graduate School of Information Sciences, Tohoku University, Japan)
21.07.–31.08.2012

Wolfgang Bangerth

(Texas A&M University, USA)
23.07.2012

Erika Kovács

(Eötvös Loránd University, Budapest, Ungarn)
23.07.–23.08.2012

Daniel Steffy

(Oakland University, USA)
25.07.–31.08.2012

Guoyan Zheng

(Universität Bern, Schweiz)
06.08.2012

Leqin Wu

(Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)
12.–25.08.2012

Yafen Liu

(Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)
12.–25.08.2012

Zaw Win

(University of Yangon, Myanmar)
16.–31.08.2012

Nam Dũng Hóang

(Hanoi University of Science and Technology)
16.08.–10.09.2012

Rujira Ouncharan

(Chiang Mai University, Thailand)
17.–25.08.2012

Hans Mittelmann

(Arizona State University, Tempe, Arizona, USA)
17.–27.08.2012

Xin Liu

(Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)
18.08.–01.09.2012

Ya-xiang Yuan

(Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)
27.08.–01.09.2012

Markus Leitner

(Technische Universität Wien)
28.08.–29.08.2012

Michael Hofmeister

(Siemens AG, München)
23.–25.09.2012

Alfred Louis

(Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
23.–25.09.2012

Ludger Sax

(Open Grid Europe GmbH, Essen)
23.–26.09.2012

Jörg Sack

(Carleton University, Canada)
22.–26.09.2012

Thomas Wolf

(Brock University, St. Catherines, Ontario, Kanada)
08.–12.10.2012

Eberhard Schrüfer

(Fraunhofer SCAI, St. Augustin)
09.–12.10.2012

Bülent Karasözen

(Middle East Technical University (METU), Ankara, Türkei)
19.–20.11.2012

TAGUNGEN UND VERANSTALTUNGEN

06.02.2012

Sitzung der Sektion Informatik der Leopoldina im ZIB

Martin Grötschel

23.–24.02.2012

5th Annual Meeting Photonic Devices, MATHÉON-Workshop, ZIB, Berlin

Frank Schmidt

27.–28.02.2012

Computational Biomechanics, MATHÉON-Workshop, ZIB

Peter Deuflhard, Corinna Klapproth, Ralf Kornhuber, Oliver Sander

21.03.2012

GI Fachgruppen-Workshop Visual Computing in Medicine and Biology

Hans-Christian Hege

16.04.2012

15 Jahre FAK: Ziel erreicht – und wenn ja wieviele? 6. FAK-Konsortialtag

KOBV-Zentrale, FAK-Geschäftsstelle

17.–18.04.2012

MXL Hands-on workshop „Meshing“

Heiko Ramm, Stefan Zachow

04.06.2012

Nur wer sich ändert, bleibt!**10. KOBV-Forum**

KOBV-Zentrale

05.–06.06.2012

DACHELA 2012

KOBV-Zentrale

03.07.2012

ERMS-Perspektiven für das FAK. Erfahrungen mit dem Open Source**ERMS CORAL. Workshop für Er-****werbungsbibliothekar/ innen aus****Mitgliedseinrichtungen des Friedrich-****Althoff-Konsortium e. V.**

KOBV-Zentrale, FAK-Geschäftsstelle

25.–27.09.2012

Tagung „Mathematics in our Changing World – How Visions Shape Reality“

Martin Grötschel, Abteilungen der FU und des ZIB

15.–17.10.2012

Herbsttagung der Fachgruppe Museumsdokumentation

Barbara Fichtl, Carlos Saro, Institut für Museumsforschung, Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund

19.10.2012

Präsentation von APA-Produkten und PsycNet

KOBV-Zentrale, FAK-Geschäftsstelle

15.–16.11.2012

ROBUKOM-Meeting

Fabio D'Andreagiovanni, Martin Grötschel, Axel Werner

23.11.2012

KOBV-Workshop Geschäftsgänge**Digitalisierung**

KOBV-Zentrale

MATHEMATIK UND INFORMATIK FÜR DIE ÖFFENTLICHKEIT

Das ZIB und seine Arbeitsbereiche erfreuen sich seit Jahren eines ständig steigenden Interesses bei Schüler- und Studentengruppen. Dies zeigt die Vielzahl von Führungs- und Vortragsveranstaltungen, die von Mitarbeitern des ZIB sowohl im Haus als auch extern durchgeführt werden.

Der Interessenschwerpunkt des Publikums liegt dabei auf den Anwendungen der Mathematik einerseits und der Informationstechnik bzw. den Hochleistungsrechnern andererseits. An beispielhaften Projekten werden mathematische Methoden, ihre Umsetzung in spezielle Algorithmen und die Bearbeitung auf Rechnern der verschiedenen Leistungsklassen demonstriert. Weiterhin werden aktuelle Forschungsarbeiten aus der Informatik und die vorhandenen Systeme im Rechner- und Datenraum mit den roboterbedienten Bandsilos vorgestellt. Während Rechner und Informatik auf ohnehin vorhandenes breites Interesse bei Schülern und Studenten stoßen, ist der Einsatzbereich der Mathematik nicht immer offensichtlich. Die Veranstaltungen tragen zur Aufklärung darüber bei, in welchen Bereichen und mit welchen Methoden die Mathematik überall eine Rolle spielt.

08.06.2012 Ein wichtiger Termin für die Außendarstellung des ZIB ist die jährliche Teilnahme an der „Langen Nacht der Wissenschaften“

Auch 2012 konnte das ZIB mit einer hohen Besucherzahl von über 1900 seine Anziehungskraft für den wissenschaftlich interessierten Laien unter Beweis stellen. Neben den schon fast als Klassiker zu bezeichnenden Präsentationen 3D-Wissenschaftskino sowie Besichtigung der Hochleistungsrechner und des Datenroboters wurden Vorträge aus fast allen im ZIB vertretenen Anwendungsprojekten geboten: z. B. Fahrstuhlsteuerung, Computergrafik, Nano-Optik, Mathematik hinter Sudoku, Bundesligatabellen und Tierbiologie. Mit lautem Schreien steuerten Kinder ein 3D-Fußballspiel, um anschließend in Ruhe an Computern oder platonischen Körpern zu basteln. Prof. Horst Zuse zog wieder viele Zuhörer zu seinen interessanten Vorträgen zur Geschichte der Computer an.

VORTRÄGE

10.02.2012

Hilberts Visionen

Vortrag anlässlich der Vorstellung eines Buches über die jüdischen Mathematikerinnen Margarete Kahn und Klara Löbenstein, Tertiumum Berlin, Martin Grötschel

20.02.2012

Nachhilfe für Picasso: Die automatische Erzeugung von Portraits und das TSP, Berlin der Begegnung, Genshagen

Einstein Stiftung Berlin, Martin Grötschel

20.03.2012

Besuch einer Studierendenrunde des Niels Brock Business College, Kopenhagen, ZIB

Peter Deußhard, Martin Weiser, Gerald Gamrath, Hans-Hermann Frese, Vincent Dercksen, Kai Pöthkow

17.04.2012

Introduction to ZIBAmira and TetraGen

FE-mesh generation workshop Heiko Ramm

17.04.2012

Using TetGen and TetraGen with ZIBAmira

FE-mesh generation workshop Hans Lamecker

17.04.2012

A multi-material FE-meshing tool

FE-mesh generation workshop Max Kahnt

26.04.2012

Mathematische Puzzle, Girl's Day 2012, ZIB

Annie Raymond und Axel Werner

11.06.2012

Besuch von Studenten der HTW Berlin, ZIB

Hans-Hermann Frese, Marco Klindt, Axel Werner

13.06.2012

Schülerbesuch der Lenné-Schule Potsdam, ZIB

Martin Weiser, Therese Pollok, Axel Werner, Hans-Hermann Frese, Heiko Ramm, Cornelia Auer

04.09.2012

Besuch einer Studentengruppe des Kold College Denmark, ZIB

Martin Weiser, Gerald Gamrath, Hans-Hermann Frese, Daniel Baum, Norbert Lindow

10.09.2012

Schülerbesuch des Canisius-Kollegs Berlin, ZIB

Peter Deußhard, Frank Schmidt, Axel Werner, Hans-Hermann Frese, Carl Martin Grewe, Olaf Paetsch

11.09.2012

Besuch einer Schülergruppe der Europaschule SII Utbremen, ZIB

Hans-Hermann Frese, Olga Heismann, Patrick Schäfer, Heiko Ramm, Alexander Wiebel

02.10.2012

Schülerbesuch des Albertus-Magnus-Gymnasiums Bensberg, ZIB

Frank Schmidt, Inken Olthoff, Torsten Klug, Ursula Droebes, Guido Laubender, Valentin Zobel, Ulrike Homberg

26.10.2012

Besuch einer Schülergruppe des Gymnasiums Remingianum Borken, NRW, ZIB

Martin Weiser, Gerald Gamrath, Wolfgang Baumann, Guido Laubender, Andrea Kratz, Christoph Petz

18.12.2012

Besuch von Schülergruppen des Humboldt-Gymnasiums Berlin und des Heinrich-Hertz-Gymnasiums Berlin, ZIB

Hans-Hermann Frese, Patrick Schäfer, Stefan Wollny, Dagmar Kainmüller, Moritz Ehlke, Vincent Dercksen

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: 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 Deufhard „Newton Methods for Nonlinear Problems-Affine Invariance and Adaptive Algorithms“

Ansprechpartner: Martin Weiser
(weiser@zib.de)

ZIBgridfree

ZIBgridfree ist eine Software zur thermodynamischen Simulation von von Wirkstoffmolekülen und Wirkstoff-Target-Komplexen.

Ansprechpartner: Marcus Weber
(weber@zib.de)

VISUALISIERUNG

ZIBAmira

ZIBAmira ist ein modulares 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: Steffen Prohaska
(prohaska@zib.de)

iCon.text

iCon.text ist eine iPad-Anwendung zur kontextuellen Exploration von Museumsobjekten. Für Ausstellungen können die Inhalte und die grafische Gestaltung ohne Programmierung angepasst werden.

Ansprechpartner: Marco Klindt
(klindt@zib.de), Steffen Prohaska
(prohaska@zib.de)

OPTIMIERUNG

SCIP Optimization Suite

Die **SCIP Optimization Suite** umfasst die Teilprodukte **SCIP**, **SoPlex**, **GCG**, **UG** und **ZIMPL**. Die fünf Produkte sind in einem Paket zu erhalten unter <http://scip.zib.de>, aber auch einzeln erhältlich.

SCIP (Mixed Integer Program Solver)
SoPlex (Implementierung des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von linearen Programmen)

GCG (ein generischer Branch-Cut-and-Price Löser basierend auf **SCIP**)

UG (Ubiquity Generator, ein Framework zur Parallelisierung von B&B basierten Lösern)

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 der Problembibliothek **ttplib** ist es, mathematische Modelle und Algorithmen für Fahrplanungs-systeme 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
(borndoefer@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 objekt-basiertes, repliziertes Cloud-Dateisystem für verteilte Systeme, vgl. Abschnitt **XtreemFS**. Die Software ist unter der BSD-Lizenz veröffentlicht und für die Betriebssysteme Linux, Windows und MacOSX verfügbar. Dokumentation sowie Links zum Quellcode und zu den Installationsquellen sind unter <http://www.xtreemfs.org> abrufbar.

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 erweitert das Anwendungsspektrum von Peer-to-Peer-Systemen um strenge Datenkonsistenz und Transaktionen, zwei Eigenschaften traditioneller Datenbank-Management-Systeme, ohne die Vorteile der Peer-to-Peer-Protokolle wie Ausfalltoleranz und Skalierbarkeit aufzugeben. Dies gelingt durch geschickte Einbettung ausfalltoleranter Algorithmen in die zugrundeliegenden strukturierten Overlay-Netzwerke. Der **Scalaris** Programmcode und weitere Informationen sind unter <http://scalaris.googlecode.com> zu finden.

Ansprechpartner: Florian Schintke
(schintke@zib.de), Thorsten Schütt
(schuett@zib.de), Nico Kruber
(kruber@zib.de)

GNDMS

GNDMS ist ein Datenmanagementsystem für Community Grids. Es wurde im Rahmen des Projektes C3Grid für die Klimaforschung entwickelt, kann aber dank flexiblen Designs leicht in anderen Grids verwendet werden. Die Software bietet einen logischen Workspace zur Trennung von Daten nach Benutzern und Anwendungsgebieten, sowie aller Funktionen, zur Bereitstellung (scriptbasiertes Staging) und dem Transfer (mittels GridFTP bzw. HTTP) von Daten.

GNDMS bietet REST-basierte Schnittstellen und setzt auf dem Spring-Framework auf. **GNDMS** ist unter der Apache License 2.0 veröffentlicht. Die aktuelle Version, Dokumentation und Entwickler-Snapshots befinden sich unter <http://gndms.zib.de>.

Ansprechpartner: Ulrike Golas (golas@zib.de), Florian Schintke (schintke@zib.de)

MR-Search

MR-Search ist ein Softwarepaket für Breiten- und heuristische Besten-Suchverfahren mit MapReduce. Es ist sowohl auf SMP-Systemen als auch in Clustern mit verteiltem Speicher einsetzbar. In der hybriden Implementation für Cluster mit Multikernprozessoren nutzt es MPI und OpenMP. Durch sein generisches Design ist es auch für andere MapReduce-basierte Algorithmen und auf anderen Hardwareplattformen einsetzbar.

Ansprechpartner: Robert Döbbelin
(doebbelin@zib.de), Thorsten Schütt
(schuett@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

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)

