

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin

ZIB

Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 2007



VORWORT

Wie in den Vorjahren legt das Zuse-Institut Berlin (ZIB) allen interessierten Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft einen Bericht über seine Tätigkeit im vergangenen Jahr vor.

Im Berichtszeitraum waren wir wieder erfolgreich in einer Fülle von Projekten aus *Anwendungsschwerpunkten* der Mathematik und Informatik tätig. Stellvertretend für viele seien hier genannt: Nanophotonik, Medikamentenentwurf, Therapie- und Operationsplanung, Landschaftsvisualisierung, Strömungsanalyse sowie Optimierung in Telekommunikation, Verkehrsplanung, Logistik oder Verteilte Rechnersysteme. *Methodische Schwerpunkte* waren, in der Mathematik, u. a. funktionsraumbasierte optimale Steuerung bei partiellen Differentialgleichungen, Laplace-Domain-Methoden, virtuelle Labore, diskrete Strukturen, Online-Optimierung und nichtlineare Optimierung sowie – in der Informatik – Skalierbarkeit, Fehlertoleranz und Transaktionen in verteilten Systemen.

Ein kurzer Überblick über unsere Forschungsaktivitäten ist in Kapitel 2.1 zusammengestellt, genauere Angaben zu den einzelnen Projektschwerpunkten finden sich im Kapitel 2.2.

Unsere *Drittmittelleinnahmen* sind – unter Einbeziehung einmaliger BMBF-Investitionsmittel für D-Grid in Höhe von 1,6 Mio. Euro – gegenüber 2006 nochmals gewachsen, diesmal auf 6,2 Mio. Euro, den höchsten Stand seit Bestehen des ZIB. Darüber hinaus haben wir uns über die Entscheidung der DFG gefreut, durch Auszahlung einer Programmpauschale die bis dahin arg gebeutelte Grundfinanzierung zu unterstützen.

Traditionell waren wir in unserer Rolle als „ehrlicher Makler“ in Verbundprojekten mit den großen Berliner Universitäten FU, HU, TU und der Charité sowie zahlreichen außeruniversitären Forschungseinrichtungen aktiv. Als Beispiele seien ausgewählt: das DFG-Forschungszentrum MATHEON (bewilligt bis 2010, zur nächsten Begutachtung anstehend 2009), der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (*KOBV*, bewilligt bis 2010), der Verbund zum Aufbau einer Grid-Infrastruktur (*D-Grid*) sowie das landesweite Wissenschaftsnetz *BRAIN*. Wir sind Mitglied in vier Sonderforschungsbereichen, drei Graduiertenkollegs, einem DFG-Schwerpunktprogramm sowie einer Reihe von BMBF- und EU-Projekten. Unsere Spin-off-Firmen sind international erfolgreich. Natürlich waren Mitglieder des ZIB auch involviert in der deutschlandweiten Exzellenzinitiative der Universitäten: Mitglieder des ZIB haben ihren Beitrag geleistet, dass die FU das ersehnte Exzellenzlabel bekommen hat.

Im Berichtszeitraum gelang uns der Durchbruch bei der Beschaffung des Supercomputersystems HLRN-II. Kurz vor Jahresende konnte endlich der Kaufvertrag unterzeichnet werden. Die erhöhte Rechenleistung wird unseren Superusern bereits ab Sommer 2008 zur Verfügung stehen, auch wenn die vollen 312 Teraflops des HLRN-Gesamtsystems an den Standorten ZIB und RRZN (Hannover) erst in der Endausbaustufe 2009 verfügbar sein werden.

Der *Wissenschaftliche Beirat* tagte am 14./15. Juni 2007. Er bescheinigte dem ZIB (einmal mehr) eine Fortsetzung der Leistungen auf höchstem Niveau. Wörtlich heißt es: „Gäbe es das ZIB nicht, müsste man es erfinden, und zwar genau so, wie es ist.“ Ein derartiges Lob ist uns natürlich Ansporn auch für die kommenden Jahre.

Berlin, im Juni 2008

A handwritten signature in black ink, reading "P. Deuffhard". The signature is written in a cursive, slightly slanted style.

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



Das Zuse-Institut in Berlin-Dahlem

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen
sind unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Das ZIB – Struktur und Ziele	7
2	Forschung und Entwicklung	12
2.1	Überblick	12
2.2	Schwerpunkte	24
2.2.1	Nano-Optik	24
2.2.2	Moleküldesign	32
2.2.3	Medizinische Therapieplanung	41
2.2.4	Biologische Systeme	54
2.2.5	Bild- und Signalanalyse	62
2.2.6	Visuelle Strömungsanalyse	72
2.2.7	Computergrafik	78
2.2.8	Ganzzahlige Optimierung	87
2.2.9	Diskrete Strukturen	98
2.2.10	Nichtlineare Optimierung und Steuerung	103
2.2.11	Logistik	108
2.2.12	Telekommunikation	118
2.2.13	Verifikation	132
2.2.14	Verkehr	137
2.2.15	Verteilte Systeme und Anwendungen	146
2.3	Auszeichnungen und Rufe	166
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	168
3.1	Überblick	168
3.2	Schwerpunkte	169
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	169
3.2.2	Math-Net und Math&Industry	174

3.2.3	Computeralgebra (REDUCE)	176
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	178
3.2.5	Studio da Vinci — Forschungslabor Visualisierung	180
4	Supercomputing und Netze	182
4.1	Supercomputing am ZIB	182
4.1.1	Hochleistungsrechner HLRN-I	182
4.1.2	Nachfolgebeschaffung HLRN-II	185
4.1.3	Wissenschaftlicher Ausschuss – ausgewählte Großprojekte .	187
4.1.4	Fachberatung	196
4.1.5	Cluster-System für Grid-Projekte	197
4.2	Das Berliner Wissenschaftsnetzwerk BRAIN	199
5	Publikationen	205
5.1	Preprints	205
5.2	Mitherausgabe von Publikationen	205
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden	206
5.4	Monographien	216
5.5	Dissertationen	216
5.6	Examensarbeiten	217
6	Software	219
6.1	Numerische Algorithmen	219
6.2	Visualisierung	221
6.3	Optimierung	222
6.4	Computeralgebra	230
6.5	Computer Science	231
6.6	Informationsdienste	235
6.7	KOBV-Dienste	237
7	Organisatorisches	243
7.1	Organe	243
7.2	Satzung	244
7.3	Wissenschaftlicher Beirat	244
7.4	Mitgliedschaften	245

7.5	ZIB-Fellows	245
7.6	Selbstverwaltung	246
7.7	Wirtschaftliche Situation	246
7.8	Spin-off-Firmen	249
7.9	Personelle Entwicklung	250
8	Ansprechpartner	252
	Anhang A: Übersicht Preprints	254
	Anhang B: Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	269
	B1: Vorträge und Gastaufenthalte	269
	B2: Vorlesungen und Seminare	287
	B3: Mitveranstalter auswärtiger Tagungen	290
	Anhang C: Tagungen und Gäste am ZIB	293
	C1: Tagungen und Gäste am ZIB	293
	C2: Gastaufenthalte	294
	C3: Tagungen und Veranstaltungen	298
	C4: Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	299
	C5: Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit	299

KAPITEL 1

DAS ZIB – STRUKTUR UND ZIELE

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

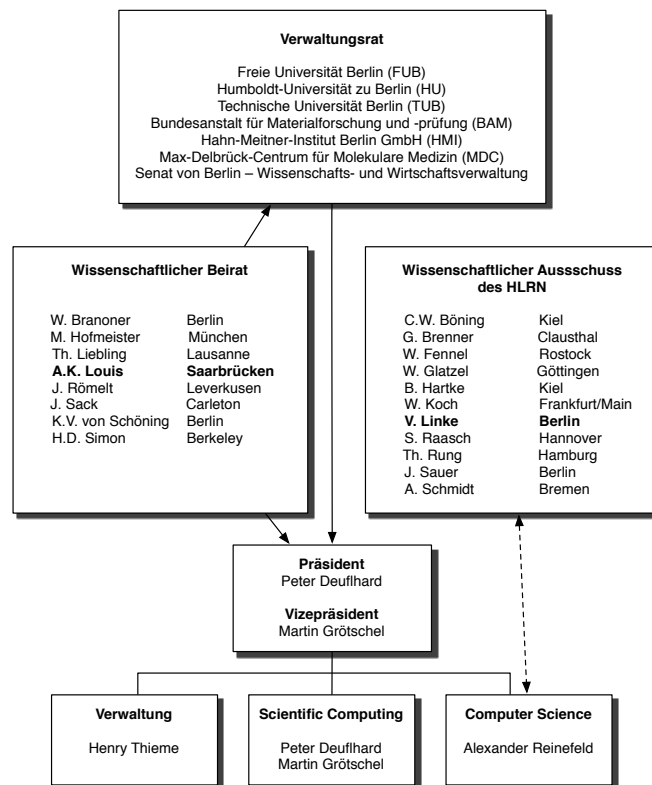


ABBILDUNG 1.1: Organisationsstruktur des ZIB (Stand: 11.02.2008)

Forschung und Entwicklung

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

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

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

Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

Das ZIB leistet Beiträge zur Lösung drängender Fragen in Wissenschaft, Technik, Umwelt oder Gesellschaft, die mit herkömmlichen Methoden nicht gelöst werden können, aber mathematischer Analyse zugänglich sind. Der Anteil des ZIB besteht dabei in der Entwicklung innovativer Algorithmen und dem Einsatz von Hochleistungsrechnern in enger Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft. Die Finanzierung der Forschungsarbeiten erfolgt im Rahmen der Grundfinanzierung des Landes Berlin und durch die Einwerbung von Drittmitteln. Neben Kooperationen mit wissenschaftlichen Einrichtungen betreibt das ZIB zur Zeit gemeinsame Projekte mit Partnern aus den Bereichen Telekommunikation, Medizintechnik, Biotechnologie, Öffentlicher Personenverkehr, Transport und Logistik, Fahrzeugbau, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energieversorgung, Nano-Optik. Das ZIB ist zudem – neben den drei Berliner Universitäten FU, TU HU und 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 als Dienstleistung

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 (siehe Kapitel 4.1). Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus den anderen Bundesländern zur Verfügung. Die Zuteilung von Rechenzeit

an Großprojekte erfolgt nach wissenschaftlichen Kriterien der DFG durch einen Zulassungsausschuss. Alle befürworteten Projekte werden von einem Fachberater begleitet.

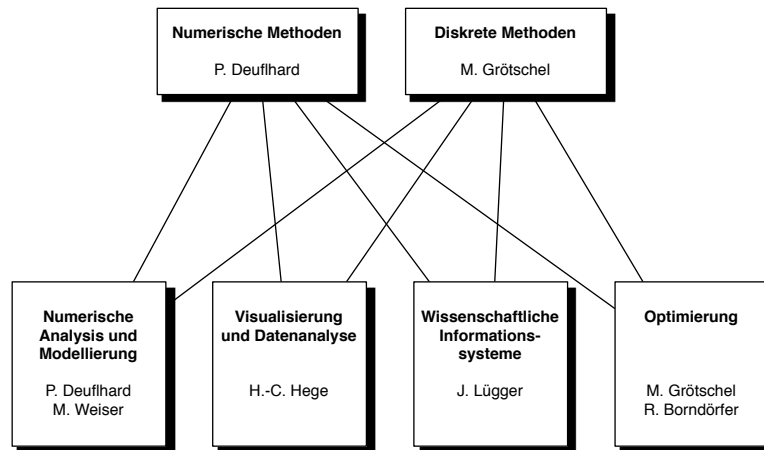


ABBILDUNG 1.2: Struktur des Bereiches Scientific Computing

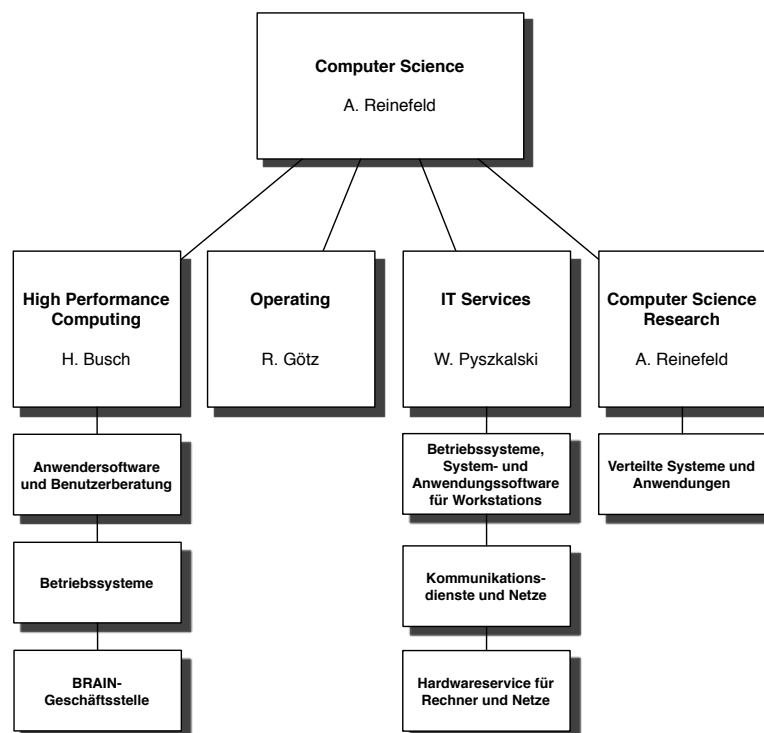


ABBILDUNG 1.3: Struktur des Bereiches Computer Science

Gliederung des Bereiches Scientific Computing

Numerische Methoden

Abteilung Numerische Analysis und Modellierung. Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten Numerischen Mathematik mit Schwerpunkt nichtlineare Modelle, insbesondere Differentialgleichungsmodelle. Ziel ist die Konstruktion von effizienten und verlässlichen Algorithmen zur Simulation, Identifikation und Optimierung (inklusive Optimal Control) bei komplexen technologischen Problemen. Dabei sind Fragen der mathematischen Modellierung häufig zwingend mit einzubeziehen. Die Abteilung gliedert sich in drei Arbeitsgruppen: „Computational Medicine“, „Computational Nano-Optics“ und „Computational Drug Design“. Derzeit behandelte Hauptanwendungsgebiete sind Biotechnologie, Nano-Optik und Medizintechnik.

Abteilung Visualisierung und Datenanalyse. Ziel der Forschungsarbeit 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 „Visualization Algorithms“«, „Visualization Systems“, „Comparative Visualization“ und „Medical Planning“. Die entwickelten Verfahren finden Anwendung in der Molekülphysik, Neuro- und Pflanzenbiologie, der medizinischen Therapieplanung, der computergestützten Chirurgie, Geo- und Astrophysik sowie der Strömungsanalyse. Die Abteilung stellt Visualisierungs-Software und -Hardware zur Verfügung und unterstützt Anwender bei der Realisierung komplexer Visualisierungsprojekte.

Diskrete Methoden

Abteilung Optimierung. Der Schwerpunkt der Forschung liegt in den Bereichen Algorithmische Diskrete Mathematik, Theorie der ganzzahligen Optimierung sowie Nichtlineare- und Online-Optimierung. Dabei steht die Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger Optimierungsprobleme im Vordergrund. Ziel ist die mathematische Analyse der hier auftretenden Modelle und – darauf aufbauend – die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren zu ihrer Lösung. Die Abteilung wird künftig in die folgenden Arbeitsgruppen gegliedert: Ganzzahlige Optimierung und Diskrete Strukturen, Telekommunikation, Verifikation und Nichtlineare Optimierung, Verkehr und Logistik. Konkrete Anwendungsprojekte gibt es derzeit in den Bereichen Logistik, Telekommunikation, Chipverifikation und Verkehr.

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

Gliederung des Bereiches Computer Science

Abteilung Computer Science Research. Im Zentrum des Forschungsinteresses liegt die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme. Profitiert wird dabei vom Zugriff auf modernste Hochleistungsrechner und Cluster, die im ZIB als Dienstleistung für die Wissenschaft betrieben werden. Die Erfahrungen aus dem Produktionsbetrieb der Parallelrechner bilden den Hintergrund für die Entwicklung zuverlässiger, skalierbarer Dienste in geographisch verteilten Systemen. Derzeit liegt der Forschungsschwerpunkt der Abteilung im Management sehr großer Datenmengen in Grid-Systemen, einer Problematik, die in unserer zunehmend vernetzten und mobilen Welt an Bedeutung gewinnt. *Abteilung High Performance Computing.* Zu den Hauptaufgaben zählt die Auswahl, Bereitstellung und Wartung von Hochleistungsrechnerkapazität sowie die fachliche Beratung der Anwender zur effizienten Nutzung der Systeme, insbesondere bei Neuentwicklungen und Anpassungen der Codes an die spezifischen Eigenschaften der im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) betriebenen Systeme. Die Abteilung koordiniert auch das Berliner Wissenschaftsnetz (BRAIN), betreibt das Sekretariat des HLRN und betreut den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN.

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

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

FORSCHUNG UND ENTWICKLUNG

2.1 Überblick

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

Zunächst werden die Teilbereiche *Numerische Methoden* und *Diskrete Methoden* des Bereichs *Scientific Computing* vorgestellt, anschließend folgt die Darstellung des Bereiches *Computer Science Research*. Typisch für alle unsere Gebiete ist eine enge Verflechtung zwischen theoretisch angelegten Grundlagenprojekten, in denen neue Methoden bereitgestellt werden, und auf die Praxis ausgerichteten Anwendungsprojekten.

Der Bereich **Numerische Methoden** des Gebietes Scientific Computing umfasst die beiden Abteilungen

- *Numerical Analysis and Modelling* (Leitung: Peter Deuffhard, Martin Weiser), untergliedert in die Arbeitsgruppen

<i>Computational Medicine</i>	(Leitung: Martin Weiser, Stefan Zachow)
<i>Computational Nano-Optics</i>	(Leitung: Frank Schmidt)
<i>Computational Drug Design</i>	(Leitung: Marcus Weber)
- *Visualization and Data Analysis* (Leitung: Hans-Christian Hege), untergliedert in die Arbeitsgruppen

<i>Visualization Algorithms</i>	(Leitung: Hans-Christian Hege)
<i>Visualization Systems</i>	(Leitung: Steffen Prohaska)
<i>Medical Planning</i>	(Leitung: Stefan Zachow)
<i>Comparative Visualization</i>	(Leitung: Ingrid Hotz)

Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

- Konformationsanalyse
- Laplace-Domain-Methode
- Funktionenraumbasierte Optimierungsmethoden
- adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden
- Merkmalsextraktion aus skalaren, vektoriellen und tensoriellen Feldern
- Virtuelle Labore

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

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Biologie: Erstellung von anatomischen und funktionellen Atlanten, Rekonstruktion von neuronalen Netzen
- Medizin: Anatomie-Rekonstruktion, Therapieplanung
- Nanotechnologie: Nano-Optik
- Physik: Gravitationsphysik und Kosmologie
- Fluidmechanik: Merkmalsanalyse und Visualisierung von Strömungen

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

Nano-Optik. In diesem Schwerpunkt wurden im Berichtszeitraum adaptive numerische Methoden und die Theorie transparenter Randbedingungen mit dem Ziel weiterentwickelt, unsere international führende Stellung bei der Simulation nano-optischer Bauteile auszubauen. Unser Vorzeigeproblem ist, wie in den Vorjahren, der Entwurf von Photolithographie-Masken, die bei der Herstellung von Chips eine zentrale Rolle spielen. In diesem Zusammenhang haben wir eine neue Modellreduktionsmethode entwickelt, die das komplexe Problem in einen rechenintensiven *Offline*-Anteil sowie in einen schnellen *Online*-Anteil aufspaltet; auf diese Weise kann eine sehr spezielle „reduzierte Basis“ vorab berechnet werden, die dann zu einer Parametrisierung des Problems mit wenigen Freiheitsgraden taugt. Die zur Herstellung geplanter Chips verwendeten Wellenlängen reichen hinunter bis in den Bereich EUV (extrem ultraviolett), im Einzelfall bis zu 13 *nm* anstelle der heutigen 193 *nm*. Die neue Methode ist sowohl schnell als auch genau: Unsere Rechnungen stimmen mit aufwendig zu gewinnenden experimentellen Resultaten hervorragend überein. Ein weiteres Anwendungsfeld ist der Entwurf neuartiger

Metamaterialien mit negativem Brechungsindex. Diese Arbeiten finden in Kooperation mit experimentellen Gruppen am Karlsruher DFG-Forschungszentrum für Nanotechnologie statt. Auch hier ist die Übereinstimmung mit den Experimenten sehr gut. Daneben haben wir die Theorie der transparenten Randbedingungen auf die Schrödingergleichung und die Drift-Diffusionsgleichung ausgedehnt, sodass jetzt auch finite Elemente höherer Ordnung bequem eingefügt werden können. Sämtliche Themen dieser Arbeitsgruppe sind drittmittelgefördert, etwa in einem Sonderforschungsreich oder durch die Halbleiterindustrie.

Moleküldesign. Wie im Vorjahr konzentrierte sich unsere Aktivität auf die Anwendung der gitterfreien Methoden in der Konformationsanalyse auf den Entwurf von Medikamenten. Im Vordergrund standen potentielle Wirkstoffe bei Diabetes mellitus Typ-II sowie auf neuartige Schmerzmittel (Opioide). Im Zuge dieser Anwendung auf immer größere Moleküle stellten sich auch neue Fragen zur numerischen Analysis, die im Rahmen einer Dissertation gelöst wurden. Als neues Thema wurde die Behandlung von Fragen der Quantenphysik durch eine Variante unserer MCMC-Methoden angegangen, wobei sich bereits im Berichtszeitraum erste Erfolge ergeben haben. Aus den Simulationsmethoden beim Wirkstoffentwurf (AG Computational Drug Design) ergeben sich zahlreiche Fragestellungen für die Visualisierung, deren mathematische Bearbeitung in der AG Visualization Algorithms erfolgt ist; hier sind im Berichtszeitraum zwei Dissertationen zum Abschluss gekommen. Außerdem konnte die Theorie der Konformationsdynamik auf interessante Fragen aus der Oberflächenchemie erweitert werden; sie werden nun in einem neu eingerichteten SFB *Multivalenz* (Sprecher R. Haag, FU Chemie) weiter verfolgt. Gegen Endes des Jahres haben wir begonnen, gitterfreie *diskrete* Methoden für die effiziente numerische Lösung ins Auge zu fassen: sie werden aus einer nichttrivialen Zusammenführung der kontinuierlichen gitterfreien Methoden (Dissertation M. Weber) und schon seit langem bekannten diskreten Galerkin-Methoden der Polymerchemie (P. Deuffhard, M. Wulkow) konstruiert. Dieses Thema, bei dem wir erst am Anfang stehen, hat enorme Konsequenzen im Bereich Systembiologie. Die Forschungsarbeiten zur Thematik Moleküldesign werden durch Mittel der DFG (zwei Stellen in MATHEON, eine in dem SFB der Chemie ab der FU Berlin) sowie der Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM) gefördert.

Medizinische Therapieplanung. Diese Thematik wird seit dem Vorjahr in enger Kooperation von zwei Arbeitsgruppen bearbeitet, der AG *Medical Planning*, bei der Fragen der Visualisierung im Vordergrund stehen, sowie der AG *Computational Medicine*, bei der Fragen der Numerik im Fokus sind.

Im Jahr 2007 lag ein wesentlicher Fokus der Arbeiten auf dem Gebiet der *orthopädischen Chirurgie*, die im Rahmen eines SFB *Muskuloskelettale Regeneration* (Sprecher M. Duda, Charite Campus Virchow) mit zwei Teilprojekten (sowie ei-

nem EU-Projekt) gefördert werden. Im Teilprojekt C4 dieses SFB werden grundlegende Verfahren für die automatisierte Rekonstruktion von komplexen anatomischen Strukturen entwickelt; Arbeiten dieser Art errangen im Berichtszeitraum den ersten Platz in einem internationalen Vergleich zur Lebersegmentierung (an dem auch Firmen wie General Electrics und Siemens teilgenommen hatten). Im Teilprojekt C5 werden robuste und schnelle numerische Verfahren für dynamische Kontaktprobleme mit Blick auf die heterogene Simulation des bewegten Kniegelenks (FEM-Modell am Knie und Mehrkörperdynamik für das restliche Bein) untersucht. Die mathematische Theorie zu unserem letztes Jahr vorgeschlagenen kontakt-stabilisierten Newmarkverfahren hat sich als erwartet schwierig erwiesen; umso mehr freut es uns, dass wir jetzt endlich erste Erfolge auch in der Theorie erzielen konnten.

Das Thema Hyperthermieplanung hat im Berichtszeitraum wichtige Erfolge gezeitigt, insbesondere in der Modellierung bisher vernachlässigter Situationen (Mehrskalmodellierung der Perfusion bis hin zum makroskopischen Steal-Effekt) sowie in der Parameteridentifizierung. Die schon seit vielen Jahren laufenden Arbeiten zur MKG-Chirurgie wurden in weitere schwierige Themenbereiche der Medizin ausgedehnt (Mittelohr-Chirurgie, Augenhöhlen-Chirurgie), woraus sich weitere mathematisch-informatische Fragen ergeben haben, die wir der Reihe nach abarbeiteten, um unsere Softwareplattform **FaceLab** weiter zu verbessern. Neu ist die Planung rhinochirurgischer Eingriffe (HNO-Chirurgie) unter Berücksichtigung der Luftströmung in der Nase beim Einatmen. Diese Rechnungen eignen sich auch zur Beurteilung der Wirkung von Nasensprays für individuelle Patienten (was im Berichtszeitraum speziell die TV-Medien angezogen hat).

Biologische Systeme. Die Techniken zur Erstellung und Visualisierung von neuroanatomischen Atlanten wurden in einem DFG-geförderten Projekt durch Einführung struktureller, geometrischer und ontologischer Hierarchien weiter verbessert. In einem neuen Forschungsprojekt werden in enger Zusammenarbeit und mit finanzieller Förderung des Max-Planck-Instituts für Neurobiologie in Martinsried (B. Sakmann, A. Borst) Verfahren entwickelt, die es ermöglichen, aus 3D-Mikroskopie-Bildern neuronale Netze möglichst komplett zu rekonstruieren. Die Netze dienen als Input für numerische Simulationen, mit denen bestimmte Entscheidungsprozesse im Gehirn von Säugetieren besser verstanden werden sollen.

Die Arbeiten zur Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten histologischen Serienschnitten und Einbettung von Genexpressionsdaten wurden weitergeführt. Der Schwerpunkt lag auf der Entwicklung von Verfahren zur Erstellung von 4D-Atlanten, die nicht nur die Anatomie und eingebettete Daten, sondern auch Wachstumsvorgänge wiedergeben. Hierzu mussten Verfahren zur Interpolation zwischen nicht-mannigfaltigen Oberflächen unterschiedlicher Topologie entwickelt werden.

In einem neuen Projekt, gefördert vom Max-Planck-Institut für Biochemie in Martinsried (W. Baumeister), werden aus hochauflösenden 3D-Kryo-Elektronentomographie-Daten subzelluläre Strukturen rekonstruiert. Im Fokus stehen Aktinnetzwerke, die die Stabilität von Einzelzellen gewährleisten und auch deren Fortbewegung ermöglichen. Unsere Aufgabe ist es, die 3D-Bilddaten zu entrauschen, die gesuchten Strukturen in den Bilddaten zu identifizieren, zu segmentieren und geometrisch zu rekonstruieren – alles möglichst automatisch und schnell. Obwohl die Arbeiten erst im November 2007 begannen, liegen bereits vielversprechende Resultate vor.

Die numerische Simulation elektrokardiologischer Modelle wachsender Komplexität wurde 2007 fortgesetzt. Noch sind unsere Rechnungen viel zu langsam; sie sind jedoch, im Gegensatz zu fast allen publizierten Simulationen, mit Fehlerkontrolle und Adaptivität in Raum und Zeit durchgeführt (adaptives Multilevel-FEM-Programm Kardos).

Die in den Vorjahren begonnene Modellierung des weiblichen Zyklus (gynäkologische Endokrinologie) führte im Berichtszeitraum zu einem umfangreichen Modell, das auch publiziert werden konnte. Trotz der Meinung einiger Kollegen, das Modell sei wohl zu groß, um praktische Verwendung zu finden, hat sich unmittelbar danach die Firma Bayer-Schering Pharma mit einem dezidierten Kooperationswunsch gemeldet. Die Simulation des Modells erfordert Zerlegungstechniken, wie sie bei großen Systemen sehr oft unvermeidbar sind. Erste Rechnungen bestätigen im wesentlichen die endokrinologischen Erwartungen. Damit ist der Weg frei, um komplexere Situationen zu modellieren (Anti-Baby-Pille unter individuellen Beschränkungen).

Bild- und Signalanalyse. Die Arbeiten in diesem Gebiet befassten sich mit mathematisch-algorithmischen Fragen wie auch anwendungsspezifischen Problemen – zu Daten recht unterschiedlicher Provenienz. Einen besonderen Schwerpunkt (auf den wir uns hier konzentrieren) bildeten die Arbeiten zur Segmentierung von klinischen Bilddaten und zur Anatomie-Rekonstruktion.

Der Erfolg der am ZIB entwickelten Verfahren zur Bildsegmentierung beruht wesentlich auf der geschickten Nutzung von Vorwissen über die zu segmentierenden Objekte, u. a. deren geometrische Form. Das Formwissen wird in statistischen Formmodellen kodiert. Im MATHEON-Projekt F2 wurde ein Basisproblem bei der Erstellung solcher Formmodelle, nämlich das Auffinden einer Korrespondenzabbildung, d. h. eines geometrisch sinnvollen Homöomorphismus, durch Minimierung eines geeignet formulierten Funktionals gelöst. Weiterhin wurden die Verfahren zur Anpassung von geometrischen Formen an Bilddaten verbessert. Dies führte zu dem bereits erwähnten Erfolg bei dem internationalen Wettbewerb zur automatischen Segmentierung einer Leber aus CT-Daten. Im Teilprojekt C4 des SFB 760 wurden Segmentierungsverfahren entwickelt, die auch aneinander grenzende Knochen in Gelenken trennen und es erlauben, realistische Modelle für

biomechanische Simulationen zu erstellen. Ein EU-gefördertes Projekt befasste sich mit der Rekonstruktion der komplexen Anatomie des Knies aus klinischen CT-Daten, zur Nutzung in der computergestützten Therapieplanung in der orthopädischen Chirurgie. Die praktischen Erfolge führten zu Kooperationsverhandlungen mit einem marktführenden, weltweit agierenden Unternehmen im Bereich der endoprothetischen Versorgung – mit guten Aussichten auf Erfolg. In einem schon laufenden Industrieprojekt mit Philips Research, Hamburg, wurde begonnen, ein Verfahren zu entwickeln, mit dem sich die knöchernen 3D-Strukturen des Thorax aus 2D-Röntgenprojektionen durch Nutzung eines statistischen Formmodells rekonstruieren lassen.

Visuelle Strömungsanalyse. Der DFG-Sonderforschungsbereich 557 *Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen* wurde erfolgreich begutachtet und um eine weitere (letzte) Periode verlängert, so dass wir unsere Arbeiten zur Strömungsanalyse fortführen konnten. Unter anderem wurden Verfahren entwickelt, die Strömungsmerkmale als Extremalstrukturen aus Indikatorfeldern extrahieren. Damit konnten wir wesentlich zum Verständnis der Strömungsphysik von aktiv beeinflussten Tragflächenumströmungen beitragen. Die Daten sind allerdings rauschbehaftet, was den Wunsch nach ableitungsfreien Verfahren zur Extraktion von Extremalstrukturen aufkommen ließ. Diesem Ziel näherten wir uns auf Basis der diskreten Morse-Smale-Theorie – zunächst über 2D; die hierbei entwickelten Verfahren konnten bereits erfolgreich zur Herausfilterung von Merkmalslinien auf Oberflächen eingesetzt werden. Zum Erkennen und Verfolgen von Vektorfeldstrukturen über die Zeit wurde ein Ansatz aus der Bildverarbeitung, die Berechnung von invarianten Momenten, erfolgreich verallgemeinert. Weiterhin wurde ein Standard-Verfahren zur Extraktion von Wirbelkernlinien für zeitabhängige Strömungen verallgemeinert. Die entwickelte Visualisierungssoftware wurde im Rahmen eines EU-Projektes, das sich mit der Vorhersage der hydrodynamischen Eigenschaften von Schiffen befasst, erfolgreich für den Vergleich von numerischen Verfahren und die Bewertung von Ergebnissen eingesetzt.

Computergrafik. Für kombinierte gitter- und punktbasierte Daten wurde ein interaktives, GPU-basiertes Volume-Rendering-Verfahren entwickelt und auf Daten aus astrophysikalischen Simulationen zu interstellaren Verteilungen von Materie und dunkler Materie angewendet. Ein weiteres Thema war die (schwierige) Darstellung von Tensorfeldern. Es wurde ein Ansatz verfolgt, der lokale Eigenschaften des Feldes mithilfe von Glyphen repräsentiert. Hierzu wurde ein Verfahren entwickelt, das eine effiziente Erzeugung von stochastischen Samples erlaubt, deren Größe und Form durch eine aus dem zu visualisierenden Feld abgeleitete Riemannsche Metrik definiert ist.

Im MATHEON-Kurzprojekt F7 wurden erste Schritte unternommen, Charakteristika von quantenmechanischen Systemen grafisch darzustellen. Mit einer neuen

Darstellungstechnik konnten u. a. Berechnungsverfahren zur Dynamik von quantenmechanischen Systemen (volle Lösung der Schrödinger-Gleichung und trajektorien-basierte Näherungsmethode) verglichen werden.

Die für fast alle Projekte praktisch sehr wichtige Geometrie- und Gittererzeugungssuite in der Software Amira wurde erheblich verbessert, u. a. durch neue Verfahren zur Optimierung der Qualität von Dreiecksnetzen (relaxierungsbasiertes, isotropes Remeshing für nicht-mannigfaltige Dreiecksgitter), zur konsistenten Zerlegung zueinander homöomorpher Flächen und zur Erzeugung von FE-tauglichen hybriden, semi-strukturierten Volumengittern.

Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung. Diese Thematik wird seit einigen Jahren sowohl in der Abteilung *Numerische Analysis und Modellierung* als auch in der Abteilung *Optimierung* behandelt. Sie stellt damit eines der wenigen Brückenprojekte der großen Bereiche „Numerische Methoden“ und „Diskrete Methoden“ dar. In der Abteilung *Numerische Analysis und Modellierung* wurden im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON (Projekt A1) zustandsbeschränkte Optimierungsprobleme bei elliptischen partiellen Differentialgleichungen untersucht. Schwerpunkt der Aktivität war die Entwicklung und Analyse von funktionsraumbasierten Innere-Punkt-Methoden. In diesem mathematisch schwierigen Feld konnten schöne neue Resultate erzielt werden, die sich in Zukunft im Gebiet der Krebstherapie Hyperthermie einsetzen lassen. Quasi als Nebenprodukt wurde ein Modell für die Impuls-Thermografie im Bauwesen (Kooperation BAM) entwickelt und numerisch gelöst. Die Resultate unserer Rechnungen stimmten gut mit den Experimenten der BAM überein, wesentlich besser als die der bisher in diesem Gebiet eingesetzten Methoden.

Der Bereich **Diskrete Methoden** besteht aus den beiden Abteilungen

- *Optimierung* mit den *methodischen Schwerpunkten*
 - Ganzzahlige Optimierung:* ZIB Optimization Suite, MIPs
 - Diskrete Strukturen:* Graphen- und Polyedertheorie
 - Nichtlineare Optimierung:* MINLP, Spezielle Strukturen Kombinatorik
- und den *Anwendungsschwerpunkten*
 - Logistik:* Produktion, Transport, Online-Optimierung
 - Telekommunikation:* Fest- und Funknetzplanung
 - Verifikation:* Chip-Design und -Verifikation
 - Verkehr:* Planung und Steuerung des ÖV
- *Wissenschaftliche Informationssysteme* mit den Schwerpunkten
 - Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*

Suchmaschinentechnologien und Math-Net

Math&Industry

Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Computeralgebra (REDUCE)

Die Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* wird in Kapitel 3 vorgestellt. Struktur und Entwicklung der Abteilung *Optimierung* stellen sich im Berichtszeitraum 2007 wie folgt dar. Die Abteilung ist in drei methodische Schwerpunkte *Ganzzahlige Optimierung*, *Diskrete Strukturen* und *Nichtlineare Optimierung* und vier Anwendungsschwerpunkte *Logistik*, *Telekommunikation*, *Verifikation* und *Verkehr* gegliedert. Die Einordnung einzelner Projekte in diesen Rahmen ist aufgrund des engen Zusammenhangs zwischen mathematischer Grundlagenforschung und der Lösung konkreter Anwendungsprobleme nicht eindeutig, die Projekte sind im Gegenteil eng miteinander vernetzt. In den angewandten Schwerpunkten greifen wir mathematische Fragestellungen von grundsätzlicher Bedeutung auf, die wir zu lösen versuchen. Dabei profitieren wir von der Weiterentwicklung der allgemeinen Methodik, die wir in den methodischen Schwerpunkten bündeln. Beispiele hierfür sind die Entwicklung der ZIB Optimization Suite mit dem Modellgenerator Zimpl und den LP- und CP/IP-Lösern SoPlex und SCIP im Schwerpunkt *Ganzzahlige Programmierung*. Diese Verfahren werden in sämtlichen Anwendungsprojekten eingesetzt; sie erleichtern z. B. die Erprobung alternativer Lösungsansätze im Projekt *Betriebshofmanagement*. Umgekehrt sind die Projekte zur Behandlung von *Symmetrien* oder von *kardinalitätsbeschränkten kombinatorischen Optimierungsproblemen* eine direkte Antwort auf Anforderungen aus verschiedenen Anwendungsprojekten.

Die Abteilung ist in eine Reihe von nationalen und internationalen Netzwerken eingebunden, darunter das DFG-Forschungszentrum MATHEON mit sechs Projekten, das DFG-Schwerpunktprogramm 1307 „Algorithm Engineering“ mit dem neuen Projekt *Exakte Ganzzahlige Programmierung*, die BMBF-Förderschwerpunkte EIBONE und 100GET – letzterer mit einem gleichnamigen neuen Projekt – und zwei COST-Aktionen der European Science Foundation. Wir unterhalten Kooperationen mit mehreren internationalen Forschungszentren und Universitäten, unter anderem mit dem *Centro de Modelamiento Matemático (CMM, Universidad de Chile)* und dem *Centre of Excellence for Mathematics and Statistics of Complex Systems (MASCOS, Australien)* mit einem neuen Projekt *Produktionsplanung im Bergbau*, mit der *Escuela Politécnica Nacional Quito* mit einem Promotionsprojekt zur *Linienplanung* in Quito und der *Universidade de São Paulo* mit einem neuen Promotionsprojekt zum *Betriebshofmanagement*, mit den Universitäten Maastricht und Kaiserslautern im Projekt *Kombinatorische Online-Planung* und mit dem *Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing* der Chinese Academy of Sciences, Beijing im neuen Projekt *Modellierung nicht-linearer Nebenbedingungen in SCIP*.

Mehrere Mitarbeiter erhielten im letzten Jahr Rufe auf Lehrstühle und andere Auszeichnungen. Arie Koster nahm einen Ruf auf eine Stelle als Assistant Professor an der Warwick Business School an der Universität Warwick in Coventry in Großbritannien an. Brigitte Lutz-Westphal einen Ruf auf eine W2-Stelle an der Hochschule Vechta. Martin Grötschel wurde ein Ehrendoktor (Bang Tien si danh du) an der Vietnamese Academy of Science and Technology (VAST) verliehen. Andreas Bley erhielt den Dissertationspreis 2007 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research, Timo Berthold den Diplomarbeitspreis 2007 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research und den Diplomarbeits-Hauptpreis 2007 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung. Andreas Eisenblätter und Hans-Florian Geerdes erhielten den „Best Paper Award“ der Konferenz „IEEE WoWMoM'07“.

Die Abteilung *Optimierung* betreibt eine Reihe von Services für die mathematische Gemeinschaft, darunter die Weiterentwicklung, Wartung und Pflege mehrerer Softwarepakete, vor allem der für akademische Zwecke frei verwendbaren ZIB Optimization Suite mit etwa 1.500 Downloads im Berichtszeitraum, und mehrere Problembibliotheken, darunter die MIPLib, die SNDLib und die Steinlib. Das Layout des Wissenschaftsnetzes des DFN-Vereins, das die deutschen Universitäten und Forschungseinrichtungen verbindet, wurde in der aktuellen Generation „X-Win“ wie seit vielen Jahren auch 2007 wieder am ZIB geplant.

Im Folgenden wird eine kurze Einordnung der Arbeit und ein Überblick über die Vernetzung der einzelnen Schwerpunkte der Abteilung *Optimierung* gegeben; eine ausführlichere Darstellung findet sich in Abschnitt 2.2.

Ganzzahlige Optimierung ist die Basismethodik in unserem Arbeitsbereich. Eine wichtige Entwicklungslinie geht zu universellen Frameworks, die es erlauben, allgemeine verwendbare Techniken mit Spezialverfahren für einzelne Probleme zu kombinieren, die wiederum verallgemeinert werden usw. Wir entwickeln mit der ZIB Optimization Suite das derzeit leistungsfähigste, nicht-kommerzielle CP/IP-Framework; es ist für akademische Zwecke im Source-Code frei verfügbar. Die Behandlung von Symmetrien (diese treten z. B. in der Linien- und Fahrplanung im Projekt *Angebotsplanung im öffentlichen Verkehr* auf), die Berechnung beweisbar korrekter Lösungen (dies spielt eine wichtige Rolle im Schwerpunkt *Verifikation*) und die Behandlung von unzulässigen Ungleichungssystemen (mit Anwendungen bei der Lösung partieller Differentialgleichungen) sowie die Verbesserung der linearen Algebra in Simplex-basierten LP- und IP-Lösern bildeten Schwerpunkte der Arbeit im Berichtszeitraum. In Kooperationen mit den Firmen ILOG, einem der wichtigsten Hersteller kommerzieller Löser, und Siemens arbeiten wir an High-Performance-Themen. Kooperationsaktivitäten zur exakten ganzzahligen Programmierung und Aktivitäten zur Entwicklung eines „Next Generation LP Solvers“ sind in Planung.

Nichtlineare Optimierung. Das langfristige Ziel dieses Schwerpunktes ist die Entwicklung allgemeiner, möglichst problemunabhängiger Löser für nichtlineare Programme und Optimalsteuerungsprobleme in Analogie zur ganzzahligen Optimierung. Wir arbeiten gegenwärtig an der Untersuchung spezieller Modelltypen, z. B. Erweiterungen von gemischt-ganzzahligen Programmen durch nichtlineare „Beimischungen“ wie quadratische Terme, die in Form von Mischungsbedingungen im Projekt *Produktionsplanung im Bergbau* oder als Bestandteil der Zielfunktion bei der Fahrplanung im Projekt *Angebotsplanung im öffentlichen Verkehr* auftreten, der Verwendung idealisierter Formulierungen wie im Projekt *Entwicklung und Test eines numerischen Modells der Impuls-Thermografie im Bauwesen*, der Ausnutzung besonderer Strukturen, etwa Netzwerkstrukturen, wie im Projekt *Optimalsteuerung von Abwassernetzen*, und der Entwicklung von Basiskomponenten, z. B. Innere-Punkte-Methoden, wie im Projekt *Analysis und Algorithmen für zustandsbeschränkte Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen*.

Diskrete Strukturen. Dieser Bereich ist in der Berichtsperiode durch Berufungserfolge, namentlich von Volker Kaibel (der im Dezember 2006 an die an die Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg berufen worden ist), Arie Koster und Brigitte Lutz-Westphal, geschrumpft. Um so erfreulicher ist, dass trotzdem in den beiden verbliebenen Projekten zur *Kardinalitätsbeschränkten kombinatorischen Optimierung* und zur *Dynamischen Programmierung versus ganzzahlige Programmierung* bemerkenswerte Ergebnisse erzielt worden, etwa eine vollständige polyedrische Charakterisierung kardinalitätsbeschränkter Matroide. Wir werden 2008 Einstellungen vornehmen, um diesen für uns fundamentalen Bereich wieder in einer seiner Bedeutung adäquaten Größe zu betreiben.

Logistik. Der Schwerpunkt Logistik entstand 2006 durch eine Zusammenlegung der beiden Vorgänger-Bereiche *Online-Optimierung* und *Produktion und Logistik*. Im Zentrum der methodischen Ausrichtung steht die Entwicklung eines neuen Konzeptes zur Bewertung von Online-Algorithmen mit Hilfe von Markov-Entscheidungsmodellen. Dieses Konzept soll die bisher in diesem Bereich verwendete kompetitive Analyse verbessern, die aus praktischer Sicht zum Teil wenig aussagekräftige Ergebnisse liefert. Im Berichtszeitraum konnten theoretische Erkenntnisse gewonnen werden, die die prinzipielle Machbarkeit dieses Ansatzes plausibel machen und weitere Forschungen aussichtsreich erscheinen lassen. Anwendungsfelder sind die sich sehr erfreulich entwickelnde Kooperation mit der Firma Kollmorgen im Bereich Aufzugssteuerung und ein Projekt zum Laserschweißen bei der Volkswagen AG; Projektvorbereitungen finden statt im Bereich der Krankenhauslogistik, der Medizintechnik, der Bergbaulogistik und zur Beantragung eines Sonderforschungsbereichs. Hinzu kommt eine Kooperation im Projekt *Betriebshofmanagement* aus dem Schwerpunkt *Verkehr* zur Behandlung von Online-Aspekten.

Telekommunikation. Der Forschungstrend in diesem Schwerpunkt geht in Richtung auf eine integrierte Planung mehrschichtiger Kommunikationsnetze unter Berücksichtigung verschiedenster problemspezifischer Anforderungen, die aus der technischen Entwicklung resultieren. Am ZIB ist sowohl das technische Verständnis als auch das mathematische Know-how und die Erfahrung vorhanden, um diese für unsere Gesellschaft wichtigen Probleme erfolgreich bearbeiten zu können. Eine Fülle von Industrieprojekten mit allen namhaften Firmen in diesem Bereich, die Einbindung der Abteilung in die europäische Forschungslandschaft und die Würdigung der Arbeit durch Preise belegen die erfolgreiche Umsetzung dieses Konzeptes. Ergebnisse dieser Arbeiten, wie etwa über Mehrgüterfluss-Schnittebenen, haben Rückwirkungen auf die Entwicklung der allgemeinen Methodik z. B. im Projekt *ILOG-Kooperation*. Weitere Kooperationen wurden mit dem Schwerpunkt *Verkehr* im Bereich der Netzplanung in Angriff genommen.

Verifikation Die Idee, die Korrektheit von Mikrochips nicht durch Simulation, sondern formal zu beweisen, führt auf die Betrachtung unzulässiger ganzzahliger Programme bzw. auf das Zählen von Lösungen ganzzahliger Constraint-Programme. Beides sind Themen von grundsätzlicher Bedeutung, die man ohne weiteres auch im Schwerpunkt *Ganzzahlige Optimierung* ansiedeln könnte. Die Einrichtung eines eigenen Schwerpunktes ist der Schwierigkeit dieser Fragen geschuldet, der man durch die Ausnutzung spezieller, auf die Situation im Chip-Design gemünzter Verfahren Rechnung zu tragen versucht. Unser Ansatz ersetzt die herkömmliche Vorgehensweise auf der „Gatter-Ebene“ durch eine Betrachtung auf einer übergeordneten „Register-Transfer-Ebene“, in der mehr Strukturinformation verfügbar ist.

Verkehr. Die Arbeit im Bereich Verkehr hat sich von klassischen Fragen der Planung von Betriebsmitteln wie Bussen und Busfahrern in der Berichtsperiode zu diesen Fragen vor- und nachgelagerten Problemen der Angebotsplanung und der Betriebssteuerung hin verlagert. Dort sind mathematische Planungsverfahren noch wenig oder gar nicht etabliert. Wir arbeiten derzeit an der Lösung von Einzelproblemen der Linien-, Fahr- und Preisplanung und an ersten Ansätzen zu deren integrierter Behandlung. Dabei treten Nichtlinearitäten und stochastische Aspekte, z. B. bei der Routenwahl der Passagiere, und spieltheoretische Aspekte, z. B. bei der Bestimmung von Preisen, auf, die zu anspruchsvollen mathematischen Modellen führen, deren Beherrschung wir Zug um Zug erarbeiten müssen. Dazu gibt es Kooperationen mit den Schwerpunkten *Ganzzahlige Optimierung*, *Nichtlineare Optimierung*, *Logistik* und *Telekommunikation*.

Der Bereich **Computer Science** umfasst die vier Abteilungen *High Performance Computing*, *IT Services*, *Operating* und *Computer Science Research*. Die ersten drei bieten Dienstleistungen im Umfeld des wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens an. Dazu gehören die fachliche Beratung unserer Supercomputer-

Nutzer, der Betrieb komplexer Rechnersysteme, Datenhaltungskomponenten und Kommunikationsnetzwerke sowie das Management des Berliner Weitverkehrsnetzwerks BRAIN. Die vierte Abteilung, Computer Science Research, bearbeitet Forschungsthemen aus dem Bereich des verteilten und parallelen Hochleistungsrechnens. Das Spektrum reicht von der Entwicklung systemnaher Software für innovative Rechnersysteme bis zum Entwurf neuer Algorithmen für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Ressourcen. Auf den untersten Softwareschichten aufbauend, werden höherwertige Systemdienste bereitgestellt, die den effizienten, benutzerfreundlichen und vor allem zuverlässigen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen. In den heutigen vernetzten Systemumgebungen sind Methoden zur selbständigen Fehlerbehebung und Software-Rekonfiguration von zentraler Bedeutung, da der überwiegende Anteil der Betriebskosten nicht auf Hard- und Software, sondern auf Löhne und Gehälter des Betriebs- und Wartungspersonals entfällt.

Verteilte Systeme und Anwendungen Die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme liegt im Zentrum unseres Forschungsinteresses. Ausgehend von vorhandenen Grid-Systemen, die zumeist auf den mittlerweile gut verstandenen, traditionellen Client/Server-Architekturen basieren, setzen wir neuartige Peer-to-Peer-Techniken ein, um die Grid-Systeme zuverlässiger und skalierbar zu machen. In Peer-to-Peer-Systemen sind alle Knoten eines verteilten Systems gleichartig. Da jeder neu hinzukommende Knoten in der Regel auch als Dienstleister fungiert, besitzen Peer-to-Peer-Systeme einen hohen Grad an Ausfallsicherheit – sofern die verteilte Systemsoftware entsprechend konzipiert wurde. Auch die selbständige Re-Konfiguration beim Ausfall von Komponenten wird durch den Einsatz von Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

Seit einigen Jahren konzentrieren sich unsere Forschungsarbeiten auf das Management sehr großer Datenmengen in verteilten Grid-Systemen. Unter der Bezeichnung *ZIB-DMS* entwickeln wir, wiederum basierend auf Peer-to-Peer-Ansätzen, skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung attributierter Dateien in verteilten Systemen. Im *ZIB-DMS*-Datenmanagementsystem spezifiziert der Nutzer eine Datei nicht wie in herkömmlichen Systemen über ihren Namen und Speicherort, sondern über Attribut-/Wertpaare, die frei gewählt werden können. Mehrere Doktoranden, Diplomanden und Studenten arbeiten an diesem Forschungsthema mit dem Ziel, eine Software zur Verwaltung von Millionen von Dateien im Grid zu entwickeln. Da die Speicherknoten in sehr großen verteilten Systemen jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine Replikation der Dateien unabdingbare Voraussetzung. Zur Unterstützung einer möglichst effektiven Replikation entwickeln wir neue Methoden für die Datenplatzierung, das Caching, Staging, Routing, Scheduling und die Synchronisation.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Nano-Optik

Zur Optimierung nano-optischer Bauteile muss die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen genau und verlässlich berechnet werden. Um dieses Ziel zu erreichen, konzentrieren wir uns auf die Entwicklung adaptiver Methoden und die Entwicklung transparenter Randbedingungen. Die von uns entwickelte Software wird im Anwendungsschwerpunkt „Simulation von Lithographiemasken für die Halbleiterindustrie“ zum Entwurf und zur Optimierung eingesetzt. Für Industriepartner bietet das ZIB-Spin-off-Unternehmen JCMwave GmbH kommerzielle, auf die jeweiligen Anforderungen zugeschnittene Softwarelösungen an.

Modellreduktion

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Jan Pomplun, Lin Zschiedrich

Kooperationspartner: Zhenhai Zhu, Cadence Design Systems, Inc.

Förderung: JCMwave GmbH, Putzbrunn

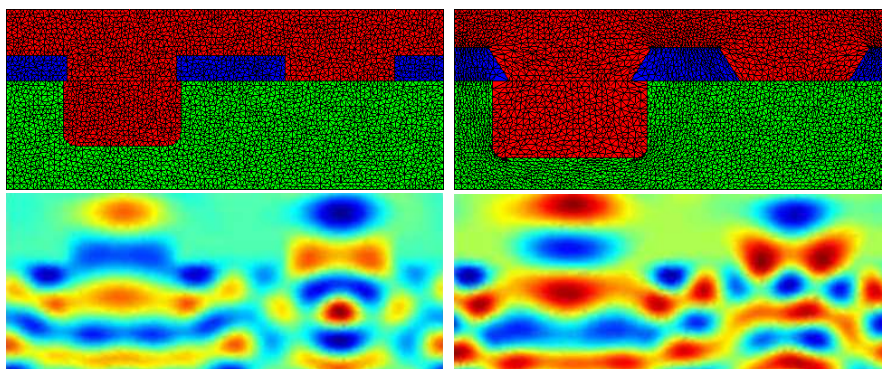


ABBILDUNG 2.1: 2D-Querschnitt einer alternierenden Phasenmaske für die Lithographie. Oben: Geometrie und Diskretisierung einer alternierenden Phasenmaske für die Lithographie mit rechteckiger (links) bzw. trapezförmiger (rechts) Deckschicht. Unten: Zugehörige Feldintensitäten.

Einer der wichtigsten Schritte in der Herstellung von Halbleiterchips ist der photolithographische Prozess, durch den die Chips ihre Strukturierung erhalten. Beim Entwurf der Photomasken für die Lithographie spielt die Simulation des Lichtdurchgangs durch die Masken eine zentrale Rolle. In der konventionellen Simulation verwendet man die sogenannte Kirchhoff-Näherung, bei der das Licht ungehindert und unbeeinflusst durch Öffnungen hindurchtritt und außerhalb von Öffnungen sofort auf Null abgedämpft wird. Für die immer kleiner werdenden Strukturbreiten (nunmehr unter 65 nm) wird diese Approximation zu ungenau.

Polarisationseffekte und Beugung spielen jetzt eine wichtige Rolle. Die eigentlich wünschenswerte numerische Lösung auf der Basis der Maxwell'schen Gleichungen ist bedingt durch die Chipgröße jedoch viel zu aufwändig. Als möglichen Ausweg untersuchen wir Modellreduktionstechniken [6]. Dabei wird der Rechenprozess in einen Offline- und einen Onlineanteil aufgespalten. Der Offlineanteil kann lange dauern und sehr aufwändig sein, der Onlineanteil hingegen muss sehr schnell absolviert werden. Bei der Berechnung der ganzen Photomaske wird dann immer nur der Onlineanteil aktiviert. Die grundsätzliche Idee besteht darin, das zu untersuchende Problem in viele kleine Teilprobleme zu zerlegen, die jeweils mittels weniger Parameter beschrieben werden können. Die Größe der Teilprobleme ist derart, das sie gerade noch mit rigorosen numerischen Verfahren im Offlineprozess gelöst werden können. Mittels Modellreduktion wird nun ein Verfahren konstruiert, das eine ausreichend genaue und sehr schnelle Onlinelösung jedes Teilproblems erlaubt.

Dabei werden für ausgewählte Punkte im Parameterraum Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen berechnet und aus diesen Projektoren konstruiert, die das hochdimensionale Ausgangsproblem in ein leicht lösbares niedrigdimensionales Problem überführen. Abbildung 2.1 zeigt ein typisches Beispiel. Hier sind die Form der Metallmaske sowie Breite und Tiefe des Phasenschlitzes parameterisiert. Im Beispiel erscheint die Deckschicht links rechteckförmig, rechts dagegen trapezförmig. Die darunter abgebildeten Felder zeigen, dass die Intensitätsverteilung sehr deutlich von der Form der Maske abhängt. Trotz dieser starken Abhängigkeit kann man das Verhalten mit relativ wenigen Basisfunktionen gut approximieren. Abbildung 2.2 zeigt das zugehörige Konvergenzverhalten, wobei zwei verschiedene Techniken zur Berechnung geeigneter Basen herangezogen wurden. Die Greedy-Variante zur Ermittlung der Basen beruht auf einem Optimierungsansatz und zeigt bessere Konvergenzeigenschaften als die zum Vergleich herangezogene Random-Variante, die einen statistischen Ansatz verwendet. Es zeigt sich, dass für einen zulässigen Fehler von 1 % eine Reduktion auf nur 50 Freiheitsgrade ausreichend ist.

Metrologie von EUV-Masken durch Scatterometrie und Finite-Elemente-Simulationen

Bearbeitet von: Jan Pomplun, Sven Burger, Frank Schmidt

Kooperationspartner: Advanced Mask Technology Center, Dresden; Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin; JCMwave GmbH, Putzbrunn

Fast alle Produkte der Halbleiterindustrie wie z. B. Speicher- und Logikchips sowie Computerprozessoren werden heutzutage mit lithographischen Verfahren hergestellt. Dabei werden die Elemente der miniaturisierten Schaltkreise, Leiterbahnen, Transistoren usw. von einer Vorlage (der sogenannten Maske) durch optische Verfahren auf Siliziumwafer abgebildet, die mit lichtempfindlichem Lack beschichtet sind. Die fortschreitende Miniaturisierung elektronischer Komponen-

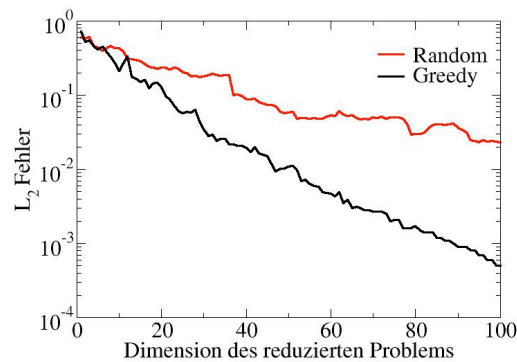


ABBILDUNG 2.2: Fehler der Simulation, basierend auf dem reduzierten System.

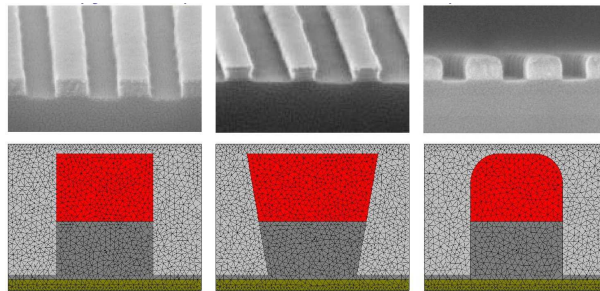


ABBILDUNG 2.3: Mikroskopische Aufnahmen von EUV-Absorberstrukturen und korrespondierende FEM-Triangulierungen.

ten macht es notwendig, bei diesem Verfahren Licht immer kürzerer Wellenlänge zu benutzen.

Einer der Hauptkandidaten für die Produktion zukünftiger Halbleiterbauelemente ist die EUV (extrem ultraviolett) Lithographie. Aufgrund der kurzen Wellenlänge (13 nm anstatt der heutigen 193 nm) müssen dafür völlig neuartige reflektierende Masken in der Produktion verwendet werden, da es für EUV-Licht praktisch kein transparentes Material gibt. Eine Voraussetzung zum Erreichen der hohen Qualitätsanforderungen an die EUV-Masken ist eine einfache und genaue Charakterisierungsmethode für die Absorberstrukturen auf einer EUV-Maske, siehe Abbildung 2.3. Zusammen mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt und dem Advanced Mask Technology Center wurde ein solches indirektes Messverfahren entwickelt [8]. EUV-Licht fester Wellenlänge und Einfallswinkel wird von der EUV-Maske reflektiert, und die Intensität des reflektierten Lichtes gemessen. Die experimentellen Daten tragen jedoch keine direkten Informationen über die untersuchten Strukturen. Daher werden Finite-Elemente-Simulationen durchge-

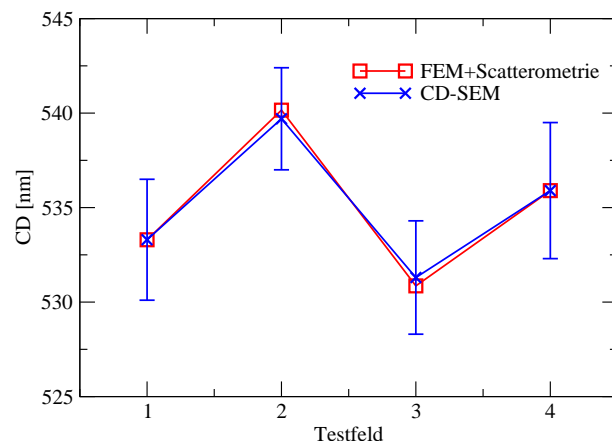


ABBILDUNG 2.4: EUV-Absorberlinien für vier Testfelder. Vergleich zwischen direkter mikroskopische Messung (CD-SEM) und indirekter FEM- und Scatterometrie-Rekonstruktion für die Breite (CD).

führt, um die Geometrie der EUV-Maske zu rekonstruieren, siehe Abbildung 2.3. Es wird diejenige Geometrie numerisch bestimmt, welche die experimentellen Daten am besten reproduziert.

Um die Richtigkeit der rekonstruierten Profile bewerten zu können, wurden die untersuchten Strukturen mit direkten elektronenmikroskopischen (CD-SEM) Methoden untersucht, die aber im Vergleich zu den Streuexperimenten sehr viel aufwändiger sind. Abbildung 2.4 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung beider Methoden für die Breite der Absorberlinien von vier Testfeldern. Die Abweichung ist dabei kleiner als 1 nm. In Zukunft soll untersucht werden, welche Parameter zusätzlich (z. B. Kantenwinkel der Absorberprofile) robust bestimmt werden können, und wie sinnvolle Aussagen über Messfehler der indirekten Methode gemacht werden können.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Iterative Löser für indefinite Gleichungssysteme (Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Gebietszerlegungsverfahren mit transparenten Randbedingungen an den Teilgebietsrändern wurden für die Lösung der Maxwellgleichung weiterentwickelt. Das Rechengebiet wird hierzu in Schichten unterteilt, was leicht möglich ist, da die meisten der von uns simulierten Bauteile aus strukturierten Schichten aufgebaut sind [12]. Die Konvergenzeigenschaften dieses Verfahrens sind in der Praxis gut, da die Materialien verlustbehaftet sind, das heißt, dass ihre Permittivität einen Imaginärteil hat. Vor allem lässt sich jedoch durch das Gebietszerlegungs-

verfahren der Speicheraufwand stark reduzieren.

Aktuell arbeiten wir an Gebietszerlegungsverfahren für allgemeinere Zerlegungen, etwa in Streifen oder schachbrettartig angeordnete Würfel.

3D-Simulationen isolierter Strukturen für die optische Mikrolithographie (Frank Schmidt, Sven Burger, Lin Zschiedrich; Kooperation: Reinhard März, Infineon Technologies AG und JCMwave GmbH; Roderick Köhle, Qimonda AG, Bernd Küchler, Christoph Nölscher, Qimonda Dresden GmbH & Co. OHG; Förderung: JCMwave GmbH)

Die optische Mikrolithographie ist ein Reproduktionsverfahren, bei dem mittels optischer Projektionsverfahren Muster auf Materialien aufgebracht werden. Die Mikrolithographie und die damit verbundenen Prozessabfolgen sind eine Schlüsseltechnologie bei der Herstellung von integrierten Schaltkreisen und Speicherbausteinen. Die Weiterentwicklung der optischen Mikrolithographie ist zur Zeit entscheidend dafür, dass die *Roadmap* der Halbleiterindustrie weiterverfolgt werden kann.

Zum Verständnis der Prozesse beim Lichtdurchgang durch die Photomaske und für das Design der Photomaske sind genaue und zuverlässige numerische Simulationen von entscheidender Bedeutung.

Im Projektzeitraum wurde ein von der Qimonda AG und der JCMwave GmbH finanziertes Projekt in diesem Kontext fortgeführt. Hierbei geht es um den Einsatz und die Weiterentwicklung von am ZIB entwickelten Finite-Elemente-Methoden zur Simulation stationärer Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen. Insbesondere wurden im Projektzeitraum Verfahren entwickelt, um effizient die Lichtstreuung an isolierten Strukturen simulieren zu können. Es konnte gezeigt werden, dass hiermit typische in der Photolithographie relevante Strukturen, wie isolierte Kontaktlöcher, sehr effektiv simuliert werden können [2]. Weiterhin wurden in Zusammenarbeit mit der Qimonda AG Studien zur Simulation großer 3D-Gebiete durchgeführt [1].

Funktionelle Nanostrukturen (Sven Burger, Benjamin Kettner, Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Martin Wegner, Stefan Linden, Christian Enkrich, Gunnar Dolling, DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen, Karlsruhe; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte D15, D9)

Metamaterialien sind nanostrukturierte Materialien, deren Strukturgröße kleiner als die Wellenlänge ist. Diese Materialien können für bestimmte Wellenlängen einen negativen Brechungsindex besitzen – eine Eigenschaft, die in der Natur nicht auftritt. In Zusammenarbeit mit unseren experimentellen Kooperationspartnern wurden verschiedene Designs für Metamaterialien für den optischen Spektralbereich mit Hilfe von Simulationen untersucht. Im direkten Vergleich

mit experimentellen Ergebnissen ergab sich jeweils eine sehr gute Übereinstimmung [4, 5]. Die Resultate wurden genutzt, um die experimentellen Ergebnisse zu interpretieren und das Design der Metamaterialien zu optimieren. Insbesondere wurden Lösungen zum Streuproblem der Maxwell'schen Gleichungen für komplexe 3D-Geometrien berechnet. Abgesehen von Transmissions- und Reflektionskoeffizienten sind hierbei auch Phaseninformationen der gestreuten ebenen Welle von Interesse. Durch die Überlagerung von mehreren ebenen Wellen um einen zentralen Einfallswinkel kann hiermit die Verschiebung eines lokalisierten Wellenpaketes berechnet werden [3].

Um dem Ziel der optischen Datenverarbeitung in Quantencomputern näher zu kommen, werden Resonatoren hergestellt und untersucht, die das Speichern und das Koppeln verschiedener Zustände sogenannter Quantenpunkte ermöglichen sollen. Solche Resonatoren können verschiedene, teilweise sehr komplizierte geometrische Formen haben und je nach Herstellungsart verschiedene Defekte aufweisen. Gegenwärtig werden am CFN Karlsruhe unter anderem säulen- und pyramidenförmige Resonatoren untersucht. Die Qualität solcher Resonatoren, der Q-Faktor, bestimmt sich aus dem Verhältnis zwischen Erhöhung der Emmissionsrate eines Quantenpunktes durch den Resonator und dem Modenvolumen des Resonators. Um eine möglichst exakte Abschätzung des bestmöglichen Q-Faktors für eine bestimmte Form des Resonators zu erhalten, und um die Vorgänge im Inneren des Resonators verstehen zu können, sind exakte, verlässliche numerische Berechnungen der Vorgänge im Resonator erforderlich. Um die Resonatoren genauer bestimmen zu können, wurde deshalb gemeinsam mit den Partnern am CFN die Abhängigkeit des Q-Faktors bei Säulenresonatoren von verschiedenen Design-Parametern wie dem Verkippungswinkel der Seitenwände und der Anzahl der Spiegelpaare auf beiden Seiten des Resonators untersucht. Dabei zeigten die Simulationen, die Position der Moden und Q-Faktoren für die jeweiligen Moden bestimmten, sehr gute Übereinstimmung mit den am CFN experimentell bestimmten Werten.

Resonanzen in offenen Systemen (Frank Schmidt, Sven Burger, Lin Zschiedrich, Roland Klose; Kooperation: Thorsten Hohage, Universität Göttingen; Werner Koch, DLR-Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik Göttingen; Förderung: DFG-Projekt „Resonanzen in offenen Systemen“ (mit T. Hohage))

Dieses im Jahr 2004 begonnene Projekt wurde im Projektzeitraum fortgeführt. Resonanzen spielen in verschiedenen Gebieten der Technik eine wichtige Rolle. Zum Beispiel ist bei der Konstruktion von mechanischen Bauteilen wie Flugzeugtragflügeln die genaue Kenntnis von Resonanzen wichtig, um Störgeräusche zu unterdrücken. Resonanzen können als Eigenschwingungen aufgefasst werden. Im Unterschied zu Eigenschwingungen geschlossener Systeme sind Resonanzen jedoch nicht normierbar.

Im Projektzeitraum wurde die Polbedingungsmethode sowohl algorithmisch als auch theoretisch weiterentwickelt. Es wurde eine Variationsmethode eingeführt, die nicht nur eine effiziente numerische Berechnung von Resonanzen erlaubt, sondern auch einen wichtigen Beitrag zum theoretischen Verständnis von Resonanzen liefert. Hierbei entstammen die Ansatzfunktionen im Innenraum dem üblichen Sobolevraum. Im Außenraum wird der Hardyraum verwendet. Bei dieser neuartigen Methode sind am Kopplungsrand des Innen- zum Außenraum keine zusätzlichen Terme mehr notwendig, was die numerische Umsetzung im Rahmen eines Finite-Elemente-Programms deutlich vereinfacht, da der Außenraum wie ein einziges infinites Element behandelt werden kann.

Simulation von photonischen Kristallfasern (Jan Pomplun, Sven Burger, Lin Zschiedrich, Frank Schmidt; Kooperation: Philip Russell, Max Planck Research Group, Erlangen; Peter J. Roberts, Technical University of Denmark, Lyngby; Förderung: JCMwave GmbH, DFG-Schwerpunktprogramm 1113)

Die Eigenschaften photonischer Kristallfasern bieten große Vorteile in einer Vielzahl von Anwendungsgebieten, wie z. B. Transmission von intensivem Licht oder hoch sensiblen Gassensoren. Aufgrund ihrer Mikrostrukturierung besitzen sie die Fähigkeit, Licht in mit Luft gefüllten Hohlkernen anstatt in Glas zu führen.

Die Finite-Elemente-Methode ist für die Berechnung von Propagationsmoden in diesen komplex strukturierten Wellenleitern der ideale Kandidat. Im Vergleich zu Standardmethoden wie der Expansion der Lösung in ebene Wellen, benötigt die FE-Methode nur einen Bruchteil der Zeit für Simulationen mit extremer Genauigkeit. Dies ermöglicht es, das Design der Fasern entsprechend dem Anwendungsgebiet zu optimieren.

Im Berichtszeitraum wurde u. a. in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Research Group um Philip Russell in Erlangen mit unserem Simulationstool das Transmissions- und Verlustverhalten von sogenannten Kagome-Hohlkern-Fasern numerisch untersucht und mit experimentellen Ergebnissen verglichen [7, 9, 10]. Weiterhin wurde der Einsatz der am ZIB entwickelten FEM-Software in der Max-Planck-Research Group etabliert.

Periodische Constraint Delaunay Triangulierung (Therese Pollok, Frank Schmidt, Benjamin Kettner; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte D15, D9)

Die Lösung der Maxwellgleichung auf unbeschränkten periodischen Gebieten wird unter Zuhilfenahme von Bloch-periodischen Randbedingungen auf die Berechnung in einer einzelnen Einheitszelle beschränkt. Die dadurch künstlich eingeführten Ränder wurden bisher bei der Triangulierung als Constraint-Kanten behandelt. Bei ungünstiger Wahl der Einheitszelle kann diese Vorgehensweise jedoch zu sehr schlechten Gittern führen bzw. die Zahl der Freiheitsgrade unnötig

hochtreiben. Um solche Effekte vollständig zu vermeiden, wurde nun ein Algorithmus für die Berechnung der periodischen Constraint Delaunay-Triangulierung entwickelt, der ohne die Einführung zusätzlicher Constraint-Kanten auskommt.

Transparente Randbedingungen für Evolutionsgleichungen (Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Daniel Ruprecht, Rupert Klein, FU Berlin)

In zwei Raumdimensionen wurden für die Schrödingergleichung und die Drift-Diffusionsgleichung auf der Polbedingung basierende transparente Randbedingungen für konvexe Gebiete entwickelt und implementiert. Durch eine neuartige Herleitung, die auf einer globalen variationellen Formulierung beruht, steht ein Rahmen zur Verfügung, in den auch finite Elemente höherer Ordnung passen [11].

Publikationen

- [1] S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, R. Köhle, T. Henkel, B. Kuchler und C. Nölscher, *3d simulations of electromagnetic fields in nanostructures*, Modeling Aspects in Optical Metrology (H. Bosse, Hg.), Bd. 6617, Proc. SPIE, 2007, S. 66170V.
- [2] S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, R. Köhle, B. Kuchler und C. Nölscher, *EMF simulations of isolated and periodic 3d photomask patterns*, Photomask Technology, Bd. 6730, Proc. SPIE, 2007, S. 6630.
- [3] G. Dolling, M. W. Klein, M. Wegener, A. Schädle, B. Kettner, S. Burger und S. Linden, *Negative beam displacement for negative-index photonic metamaterials*, Optics Express **15** (2007), Nr. 21, 14219–14227.
- [4] G. Dolling, M. Wegener, A. Schädle, S. Burger und S. Linden, *Observation of magnetization waves in negative-index photonic metamaterials*, Appl. Phys. Lett. **89** (2006), 231118.
- [5] S. Linden, C. Enkrich, G. Dolling, M. W. Klein, J. Zhou, T. Koschny, C. M. Soukoulis, S. Burger, F. Schmidt und M. Wegener, *Photonic metamaterials: Magnetism at optical frequencies*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics **12** (2006), 1097–1105.
- [6] A. Patera und G. Rozza, *Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for parametrized partial differential equations*, version 1.0, copyright mit 2006, 2007 Aufl., MIT Pappalardo Graduate Monographs in Mechanical Engineering, 2007, to appear.
- [7] G. J. Pearce, G. S. Wiederhecker, C. G. Poulton, S. Burger und P. S. J. Russell, *Models for guidance in Kagome-structured hollow-core photonic crystal fibres*, Optics Express **15** (2007), 12680.

- [8] J. Pomplun, S. Burger, F. Schmidt, F. Scholze, C. Laubis und U. Dersch, *Finite element analysis of euv lithography*, Modeling Aspects in Optical Metrology (H. Bosse, Hg.), Bd. 6617, Proc. SPIE, 2007, S. 661718.
- [9] J. Pomplun, S. Burger, L. Zschiedrich und F. Schmidt, *Adaptive finite element method for simulation of optical nano structures*, phys. stat. sol. (b) **244** (2007), 3419.
- [10] J. Pomplun, L. Zschiedrich, R. Klose, F. Schmidt und S. Burger, *Finite element simulation of radiation losses in photonic crystal fibers*, phys. stat. sol. (a) **204** (2007), 3822.
- [11] A. Schädle, D. Ruprecht und F. Schmidt, *Transparent boundary conditions – the pole condition approach*, Proceedings of Waves 2007 (e. N. Biggs, Hg.), 2007, S. 301–303.
- [12] A. Schädle und L. Zschiedrich, *Additive Schwarz method for scattering problems using the PML method at interfaces*, Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI (O. B. Widlund und D. E. Keyes, Hg.), Lecture Notes in computational Science and Engineering, Bd. 55, Springer, 2007, S. 205–212.

2.2.2 Moleküldesign

Die Anwendung der gitterfreien Methoden in der Konformationsdynamik auf konkrete Beispiele aus Pharmazie, Medizin und Chemie bildeten den Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Computational Drug Design im Jahr 2007. Aus den ersten Erfahrungen mit diesen Anforderungen wurde klar, dass unsere Software ZIBgrid-free, die im Berichtszeitraum einer Neustrukturierung unterzogen wurde, noch einer Reihe von Erweiterungen bedarf, die noch nicht abgeschlossen sind. Auch neue mathematische Anforderungen entstanden aus den angegangenen Kooperationen. Auf dem Gebiet der Fehleranalyse und der Umgewichtungsstrategien zur numerisch stabilen Berechnung von Zustandsdichten wurden erste wichtige Schritte bereits vollzogen. Die Visualisierung von Molekülkonformationen wurde durch zwei Promotionen an der Freien Universität zu einem Abschluss gebracht. Eine Modellierung der molekularen Systeme wird jedoch auch in Zukunft noch zu verbessern sein.

Wirkstoffentwurf

Bearbeitet von: Marcus Weber, Alexander Bujotzek, Olga Scharkoi, Karsten Andrae

Kooperationspartner: Jörg Rademann, Leibniz-Institut für Molekulare Pharma-

kologie (FMP); Christoph Stein, Hua Fan, Charité, Campus Benjamin Franklin
Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A4

Im Berichtszeitraum wurde mit Hilfe der am ZIB verfügbaren Methoden zum Wirkstoffentwurf weiter an dem Projekt der Dipeptidylpeptidase-4-Inhibierung (DPP4) gearbeitet. Von einer Inhibierung dieses Proteins verspricht man sich eine Regulation des Zuckerhaushalts bei Patienten mit Diabetes mellitus Typ II. Aufgrund der erfolgreichen Anwendung der Methoden wurde ein weiterer Wirkstoffentwurf initiiert, der eine Verbesserung von Schmerzmitteln (Opiode) zum Ziel hat. Diese Arbeiten dienen zur Vorbereitung eines Sonderforschungsbereichs in der Pharmazie.

Diabetes mellitus Typ II. Um die vom ZIB entwickelten Designvorgaben für einen möglichen DPP4-Inhibitor in ein tatsächliches Molekül umzusetzen, haben wir im Berichtszeitraum eine Kooperation mit der Arbeitsgruppe Medizinische Chemie von Jörg Rademann begonnen und die Kooperation mit der Arbeitsgruppe von Frau Hua Fan an der Charité fortgeführt. Es hat sich gezeigt, dass eine Synthese unseres Wirkstoffes schwierig ist. Die chemische Struktur unseres Inhibitor Kandidaten benötigte noch Anpassungen, die auf Basis unserer Designvorgaben vorgenommen wurden. Auf einem anschließenden Messebesuch auf der Biotechnica in Hannover konnten wir jedoch keinen Industriepartner für die Finanzierung der Wirkstoffsynthese finden [5]. Mittlerweile gibt es kommerziell verfügbare DPP4-Inhibitoren, weshalb das industrielle und wissenschaftliche Interesse an einem neuen Wirkstoff gesunken ist. Daher haben wir uns am Ende des Berichtszeitraumes darauf konzentriert, unsere Methoden in Richtung Wirkstoffoptimierung auszubauen, was eine Reihe von Softwareanpassungen in ZIBgridfree notwendig gemacht hat, die erst innerhalb des Jahres 2008 zu einem Abschluss kommen werden.

Simulation von Opioiden. Zunächst als Vorarbeit für einen geplanten Sonderforschungsbereich der Pharmazie an der FU Berlin gedacht, beschäftigte uns im Berichtszeitraum die Frage, warum Schmerzmittel wie Morphin bei entzündetem Gewebe anders wirken als bei gesundem Gewebe. Aus chemischer Sicht hat entzündetes Gewebe einen niedrigeren pH-Wert und eine leicht erhöhte Temperatur. Die Vermutung der Arbeitsgruppe von Christoph Stein an der Charité war, dass sich die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Konformationen des Opioid-Rezeptor-Komplexes durch die verschiedenen Bedingungen ändern. Zunächst wurde dazu mit Methoden des Molecular Modelling (ähnlich wie in [3]) und des Dockings [4] eine mögliche Bindungsposition des Morphins in dem μ -Opioid-Rezeptor ausfindig gemacht. Diese Position deckte sich mit bereits vorliegenden experimentellen Studien. Danach wurde untersucht, welche Faktoren von einer pH-Wert-Änderung beeinflusst werden. Temperaturabhängige Konformationsänderungen des Morphins konnten durch Simulation mittels ZIBgridfree

als These nicht bestätigt werden. Auch eine elektrostatische Berechnung des μ -Rezeptors zeigte, dass vermutlich die Änderung des pH-Wertes zu wenig Einfluss auf die Konformation dieser Struktur nehmen kann. Letztendlich wurde die These formuliert, dass eine Änderung des Protonierungszustandes des Rezeptors für die unterschiedliche Wirksamkeit verantwortlich ist und entsprechende Aminosäuren in der Bindetasche identifiziert. Die experimentelle Bestätigung dieser These steht noch aus. Eine Bachelorarbeit zu diesem Thema entstand im Anfang des Berichtszeitraumes [10]. Am Ende des Jahres führten Simulationen von Morphin in der Bindetasche des μ -Rezeptors zu einem Designvorschlag für ein morphinähnliches Molekül, das eine noch selektivere Wirkung nur auf entzündetes Gewebe haben soll, siehe auch Abbildung 2.5. Dadurch könnten also schädliche Nebenwirkungen von Morphin vermindert werden. Die Identifizierung eines entsprechenden Moleküls wird 2008 fortgeführt.

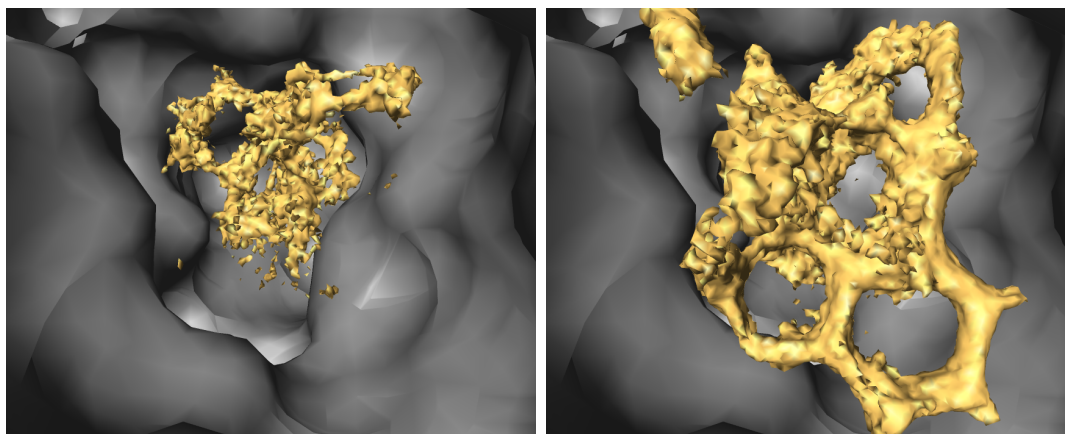


ABBILDUNG 2.5: Zwei metastabile Konformationen von deprotoniertem Morphin in der Bindetasche des μ -Opioid-Rezeptors. Darstellung durch Isoflächen. Nicht nur durch die Form des Morphinmoleküls sind Konformationen unterschieden, sondern auch durch die Position des Moleküls in der Bindetasche.

Konformationskinetik

Bearbeitet von: Marcus Weber, Peter Deuffhard, Susanna Kube, Vedat Durmaz

Kooperationspartner: Christof Schütte, AG Biocomputing, FU Berlin; Roland Becker, Robert Köppe, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A4; Kooperationsvertrag zwischen ZIB und der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

In der Konformationskinetik nutzt man Simulationen auf molekularer Ebene, um daraus Informationen über die Übergangsraten zwischen Konformationen zu

erhalten. Bei der Vergrößerung von Markov-Prozessen auf die Betrachtung von Übergängen zwischen Teilmengen eines Zustandsraumes geht jedoch im Allgemeinen die Markov-Eigenschaft des Prozesses verloren. Erste Ergebnisse dazu, wie eine Vergrößerung von Markov-Prozessen korrekt ausgeführt wird, sind bereits Anfang 2007 publiziert worden [7]. Innerhalb des Berichtszeitraumes wurde hierzu spezieller bewiesen, dass die Markov-Eigenschaft bei der Vergrößerung erhalten bleibt, wenn man das Konzept der fast-charakteristischen Funktionen und die Robuste-Perron-Cluster-Analyse (PCCA+) nutzt, die in den letzten Jahren am ZIB entwickelt wurden. Dieses Resultat wurde in einem ZIB-Report festgehalten [11] und diente als theoretische Grundlage für eine Kooperation mit der BAM [12]. In dieser Kooperation wurde das konformationskinetische Verhalten eines wichtigen Flammschutzmittels simuliert und qualitativ mit experimentellen Daten verglichen. Wichtig war hierbei die Einsicht, dass Simulationen basierend auf klassischen Kraftfeldern dazu beitragen können, Interkonvertierungsvorgänge in einem Molekül zu quantifizieren, indem untersucht wird, welcher statistische Anteil der möglichen Molekülkonformationen in einem kanonischen Ensemble in der Lage ist, eine Interkonvertierungsreaktion einzuleiten. Hieraus konnte die Kinetik der Interkonvertierungsreaktionen errechnet werden.

Markov-Ketten-Monte-Carlo-Verfahren in der Quantenphysik

Bearbeitet von: Susanna Kube, Marcus Weber, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Caroline Lasser (FU Berlin)

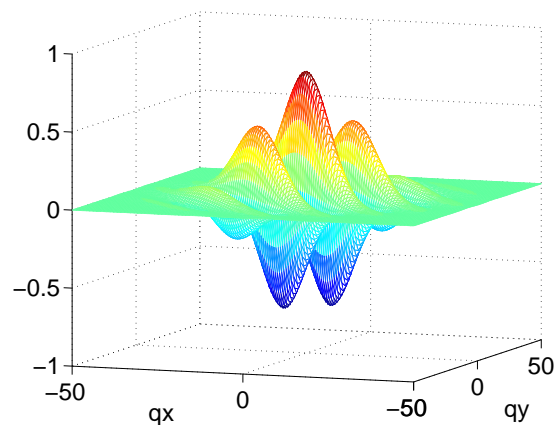


ABBILDUNG 2.6: Beispiel für einen Integranden bei der Berechnung der Wigner-Funktion mittels Monte-Carlo-Quadratur.

In diesem Projekt geht es um das Monte-Carlo-Sampling von Wigner-Funktionen, wie sie z. B. im Zusammenhang mit Partikelmethode für Schrödinger-Gleichungen im semiklassischen Regime auftreten. Sampling-Methoden werden sowohl zur

Approximation als auch zur Quadratur verwendet. Die Approximation erfordert eine Anpassung des Metropolis-Monte-Carlo-Algorithmus auf reellwertige Funktionen mit unzusammenhängendem Träger. Insbesondere muss die erzeugte Markov-Kette Sprünge zwischen verschiedenen Gebieten beinhalten. Dieses Problem ist identisch zu dem Sampling-Problem bei metastabilen Teilmengen in der Konformationsdynamik. Hier nutzten wir unsere Erfahrungen mit der **Conf-Jump**-Methode, siehe auch [14]. Da die verschiedenen Teilmengen, zwischen denen gesprungen wird, im Beispiel der Wigner-Transformation strukturell ähnlich sind, konnte die Konstruktion solcher Sprungschritte mit hoher Akzeptanzrate gelingen. Für die Quadratur wurde Importance Sampling mit Gaußscher Gewichtsfunktion verwendet. In einigen Phasenraumpunkten ist das Quadraturproblem aufgrund hochfrequenter Oszillationen schlecht konditioniert, vergleiche Abbildung 2.6. In den betrachteten Anwendungen ist die Wigner-Funktion in diesen Punkten jedoch so klein, dass sie vernachlässigt werden konnten. Es wurde ein Konvergenzkriterium entwickelt, das, basierend auf der Varianz zwischen verschiedenen Samplingketten, diese Punkte identifiziert. In drei verschiedenen numerischen Experimenten wurde gezeigt, dass der vorgeschlagene Monte-Carlo-Ansatz Resultate liefert, deren Genauigkeit mit konvergierten gitterbasierten Lösungen mit analytischer Auswertung der Wigner-Funktion vergleichbar sind [6].

Virtuelles Moleküllabor

Bearbeitet von: Hans-Christian Hege, Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg

Kooperationspartner: Christof Schütte, AG Biocomputing, FU Berlin; Mercury Computer Systems, Berlin

Förderung: Microsoft Research, Cambridge, Vereinigtes Königreich

Multiples Oberflächenalignment von Wirkstoffmolekülen. Die punkt-basierte Überlagerung molekularer Oberflächen, die in den Vorjahren entwickelt worden ist, wurde erweitert auf die Überlagerung von mehr als zwei Oberflächen. Dies ermöglicht die Identifikation von Gemeinsamkeiten zwischen mehr als zwei Molekülen und schafft damit eine Basis zur Erzeugung eines Pharmakophor-Modelles, das die wesentlichen physiko-chemischen und strukturellen Eigenschaften eines potentiellen Wirkstoffmoleküls beschreibt. Die Arbeit an diesem Thema wurde im ersten Quartal des Berichtszeitraumes abgeschlossen, und die Ergebnisse wurden in der Dissertation von Daniel Baum [1] zusammengefasst und publiziert.

Hierarchisches Alignment molekularer Zustandsdichten. Im Vorjahr wurde ein iterativer Algorithmus entwickelt, der eine optimale relative Ausrichtung vieler Formen desselben Moleküls zueinander berechnet. Diese Methode zeichnet sich dadurch aus, dass in der dabei optimierten Zielfunktion eine hierarchische

Klassifikation der Unterschiede verschiedener Formen berücksichtigt wird.

Im aktuellen Berichtszeitraum wurde eine Methode erarbeitet, mit der eine solche Zielfunktion für eine Menge von Formen eines Moleküls und eine Zuordnung dieser Formen zu metastabilen Mengen aufgestellt werden kann. Es werden dabei zunächst Ähnlichkeiten und Unterschiede von Teilgeometrien der verschiedenen metastabilen Konformationen identifiziert. Auf dieser Basis wird eine Klassifikation aller Geometrien abgeleitet, die angibt welche Geometrien bezüglich welcher Atome als ähnlich betrachtet werden können. Die Klassifikation ist abhängig von der Auswahl einer Atomgruppe, in der sich alle Geometrien ähneln. Mit Hilfe dieser Auswahl ist es möglich, einen Visualisierungsfokus zu wählen, siehe auch Abbildung 2.7.

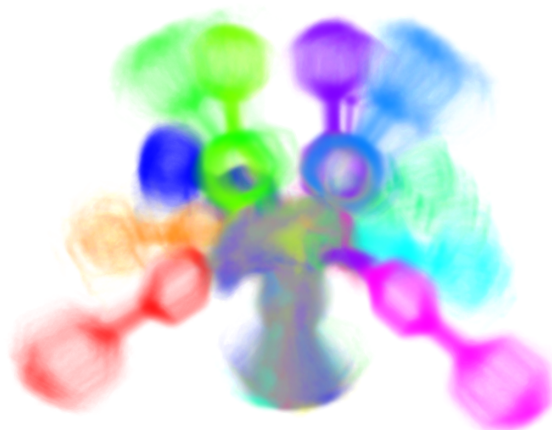


ABBILDUNG 2.7: Konformationsdichtedarstellung des Moleküls BSI mit 192 metastabilen Konformationen. In der Darstellung werden zwölf Gruppen von geometrisch ähnlichen Konformationen farblich unterschieden. Die Ausrichtung beruht ebenfalls auf diesen Gruppen.

Die Arbeiten zum Ausrichtungsproblem bei der Visualisierung molekularer Zustandsdichten wird mit der Fertigstellung der Dissertation „Analysis and Visualization of Molecular Conformations“ von Johannes Schmidt-Ehrenberg im Jahr 2008 abgeschlossen.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Gitterfreie Methoden (Marcus Weber, Peter Deuffhard, Susanna Kube, Alexander Riemer, Alexander Bujotzek; Kooperation: Monika Schäfer-Korting (FU Pharmazie); Klaus D. Kramer (FU Physik))

Im Jahr 2007 wurde intensiv an der Umsetzung und Erweiterung der gitterfreien Methode in einem Softwarecode ZIBgridfree gearbeitet. Schwerpunkt bildete dabei die Bestrebung, ZIBgridfree für die Verwendung alternativer Kraftfelder

vorzubereiten. Diese Erweiterung wurde notwendig, da in Vorarbeiten zu einem geplanten SFB (FU Pharmazie) Nanopartikel untersucht werden sollten, die nicht mit Hilfe einfacher Kraftfelder berechnet werden können. Weiterhin war die adaptive hierarchische Verfeinerung bisher nur ein theoretisches Konstrukt und wurde nun auch in ZIBgridfree eingebaut. Erste Arbeiten zur Konditionsbetrachtung adaptiver Samplings wurden publiziert [14]. Weiterhin wurde untersucht, ob sich gitterfreie Methoden auch umsetzen lassen, wenn einem Anwender nur Standardsoftware zur Simulation von Molekülen zur Verfügung steht [13].

Proteinabweisende Oberflächen (Marcus Weber, Alexander Bujotzek, Karsten Andrae; Kooperation: Rainer Haag (FU Berlin, Chemie); Frank Cordes (getlig&tar GbR))

In Vorarbeiten zu einer erfolgreich begutachteten Sonderforschungsbereichsinitiative (SFB 765) der Chemie an der FU Berlin haben wir proteinabweisende Oberflächen untersucht, siehe Abbildung 2.8. Experimente und Simulationen stützen

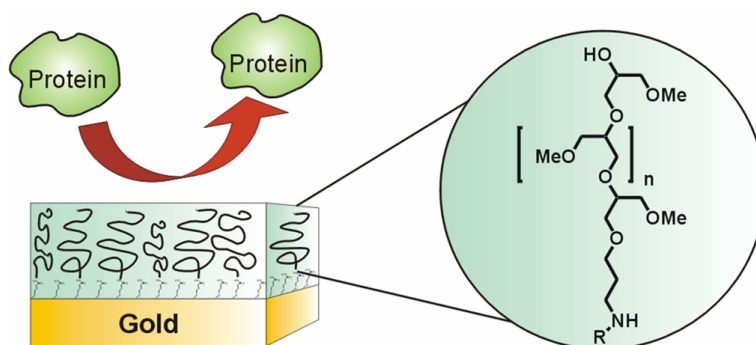


ABBILDUNG 2.8: Proteinabweisende Oberflächen. Es wurden Derivate linearer Polyethylenglycol-Ketten untersucht.

dabei die Hypothese, dass Unterschiede in der Flexibilität der Molekülstrukturen dazu führen, dass die Oberflächen verschieden stark Proteine abweisen. Aus chemischer Sicht entspricht dies einer Entropiedifferenz zwischen den Polymeren. In den Simulationen wurden verschiedene Entropieschätzer getestet. Zur Simulation mit explizitem Wasser wurde die Nutzung von etablierten Kraftfeldern und auch eine nachträgliche Umgewichtung der erzeugten Konformationsdichten auf eine Lösungsumgebung in Erwägung gezogen. Von ZIBgridfree erhoffen wir uns, in dem ab 01.01.2008 bewilligten Sonderforschungsbereich 765 eine Methode einbringen zu können, die Entropieunterschiede verschiedener Strukturen numerisch stabil und mit hoher Genauigkeit errechnen kann. Hierzu ist jedoch noch die ConfJump-Methode zur Umgewichtung von Teildichten im Konformationsraum auf die Simulation mit explizitem Wasser anzupassen, siehe auch [14]. Dies ist der nächste Arbeitsschritt, der in dem Projekt C2 im SFB 765 erbracht wird.

Gitterfreie Methoden für die Chemische Mastergleichung

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Isabel Reinecke, Marcus Weber, Susanna Kube

Kooperationspartner: W. Huisinga, Hamilton Institute, Dublin, Irland; T. Jahnke, TH Karlsruhe; S. Engholm, Universität Uppsala, Schweden; M. Wulkow, Computing in Technology GmbH (CiT), Rastede; R. Haag, FU Berlin

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A13

Die erfolgreichen Arbeiten auf dem Gebiet der diskreten Galerkin-Methoden in der Polymerchemie wurden im Berichtszeitraum auf die Lösung der Chemischen Mastergleichung angewendet [2]. Erste Überlegungen, wie man die zu berechnenden Integrale in hohen Dimensionen auswertet, führten auf einen gitterfreien Ansatz und damit zu ähnlichen Methoden, die innerhalb von ZIBgridfree [14] oder bei hochdimensionalen Integralen zur Berechnung von Wigner-Funktionen Verwendung finden [6].

Die gitterfreien Methoden, die in der Arbeitsgruppe Computational Drug Design am ZIB entwickelt wurden, basieren auf kontinuierlichen Räumen. Hier wurde ein Übergang zu diskreten Räumen notwendig und damit ein Wechsel von der l_2 - zur l_1 -Norm. Auch wurde in der Arbeitsgruppe bisher keine Propagation von Dichtefunktionen, sondern nur die Darstellung der stationären Verteilung, sowie statistische Ansätze zur Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten entwickelt. Daher wurde als Ansatz zur Lösung der Chemischen Mastergleichung die Rothe-Methode gewählt. Durch diesen Ansatz (Zeitdiskretisierung zuerst, dann Raumdiskretisierung) wird die Lösung auf Randwertprobleme, die eine Approximation von diskreten Dichten zu diskreten Zeitpunkten benötigen, zurückgeführt.

Bei der zeitlichen Propagation der Dichten wird eine Abwandlung des Markov-Ketten-Monte-Carlo-Verfahrens eingesetzt, das in ZIBgridfree zur Erzeugung der Boltzmann-Verteilung verwendet wird. Wichtig war es hierbei, die Differentialgleichung implizit zu lösen, da diese steif ist.

Zukünftige Anwendungsfelder für die Chemische Mastergleichung wurden im Bereich der Systembiologie aufgetan, hier wurde erfolgreich ein Modell zur Simulation des menschlichen Menstruationszyklus etabliert [8, 9].

Publikationen

- [1] D. Baum, *A point-based algorithm for multiple 3d surface alignment of drug-sized molecules*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 2007.
- [2] P. Deuffhard, W. Huisinga, T. Jahnke und M. Wulkow, *Adaptive Discrete Galerkin Methods Applied to the Chemical Master Equation*, SIAM J. Scientific Computing Special Issue on Computational Science and Engineering, Angenommen.

-
- [3] C. Förster, A. B. E. Brauer, J. P. Fürste, C. Betzel, M. Weber, F. Cordes und V. A. Erdmann, *Visualization of the tRNA(Ser) acceptor step binding site in the seryl-tRNA synthetase*, BBRC **362** (2007), Nr. 2, 415–418.
- [4] A. Gürler, S. Moll, M. Weber, H. Meyer und F. Cordes, *Selection and flexible optimization of binding modes from conformation ensembles*, Biosystems (2007).
- [5] R. Kellermann, M. Weber und A. Bujotzek, *Vom Dietrich zum Sicherheits-schlüssel – Mathematiker des MATHEON simulieren neuen Wirkstoff für die Diabetes-Behandlung*, Newsletter 2, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Herbst 2007.
- [6] S. Kube, C. Lasser und M. Weber, *Monte Carlo sampling of Wigner functions and surface hopping quantum dynamics*, Report 07-17, ZIB, 2007, submitted for publication.
- [7] S. Kube und M. Weber, *A coarse graining method for the identification of transition rates between molecular conformations*, J. Chem. Phys. **126** (2007), Nr. 024103.
- [8] I. Reinecke und P. Deuffhard, *Model development and decomposition in physiology*, Handbook of Research on Systems Biology Applications in Medicine (A. Daskalaki, Hg.), Angenommen.
- [9] I. Reinecke und P. Deuffhard, *A complex mathematical model of the human menstrual cycle*, Theor. Biol. **247** (2007), 303–330.
- [10] O. Scharnoi, *Simulation von Opioiden unter Hinzunahme von Temperatur und pH-Wert*, Bachelorarbeit, Freie Universität Berlin, Bioinformatik, 2007.
- [11] M. Weber, *Conformation-based Transition State Theory*, Report 07-18, ZIB, 2007.
- [12] M. Weber, R. Becker, R. Köppen und V. Durmaz, *Classical hybrid Monte-Carlo simulations of the interconversion of hexabromocyclododecane*, Report 07-31, ZIB, 2007.
- [13] M. Weber, S. Kube, A. Riemer und A. Bujotzek, *Efficient sampling of the stationary distribution of metastable dynamical systems*, Report 07-03, ZIB, 2007.
- [14] M. Weber, S. Kube, L. Walter und P. Deuffhard, *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems*, Multiscale Model. Simul. **6** (2007), Nr. 2, 396–416.

2.2.3 Medizinische Therapieplanung

Die modellgestützte Therapieplanung in der Medizin stellt weiterhin einen Schwerpunkt der Aktivitäten des Bereiches *Numerische Methoden* am ZIB dar. Die Arbeitsgruppen *Computational Medicine* und *Medical Planning* arbeiteten dabei eng zusammen. Im Berichtszeitraum lag der Fokus auf der orthopädischen Chirurgie, die im Rahmen eines EU-Projektes und eines Sonderforschungsbereiches verfolgt wird. Für die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie wurde sowohl an der Erstellung von statistischen Formmodellen zur Beschreibung der Normalanatomie als Grundlage für die chirurgische Rekonstruktion gearbeitet, als auch an nichtlinearen Modellierungsansätzen für die Simulation von Weichgewebedeformation. Im Bereich der Hals-, Nasen- und Ohrenchirurgie wurden innovative Planungskonzepte für die Rhinochirurgie und die Mittelohrchirurgie auf Basis patientenspezifischer Anatomiemodelle entwickelt. Simulationen der Kardiophysiologie erhielten im Berichtszeitraum eine neue Qualität und die Therapieplanung in der onkologischen Leberchirurgie wurde erfolgreich fortgeführt. Allen Projekten liegen geometrische Patientenmodelle zu Grunde, an denen Planungen und Simulationen durchgeführt werden. Die Erstellung geeigneter geometrischer Modelle ist daher ein zentrales Thema beider Arbeitsgruppen.

Therapieplanung in der orthopädischen Chirurgie

Bearbeitet von: Heiko Seim, Dagmar Kainmüller, Stefan Zachow, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Mark Taylor, School of Engineering Sciences, University of Southampton Highfield, Vereinigtes Königreich; Manuel Doblaré, Universität Saragossa, Spanien; Markus Heller, Centrum für Muskuloskeletale Chirurgie (CMSC), Charité Campus Charité Mitte; Georg Duda, Georg Bergmann, Charité Campus Charité Mitte; Ralf Kornhuber, Institut für Mathematik, FU Berlin

Förderung: EU-FP6-Projekt 27252 „DeSSOS“, SFB 760

Die Therapieplanung für die orthopädische Chirurgie wird in zwei Projekten bearbeitet, die eng miteinander verknüpft sind. Im Rahmen des EU-Projektes DeSSOS (Decision Support Software for Orthopedic Surgery) werden anwendungsnahe Methoden und Werkzeuge für die prä- und intraoperative Planung von Knie-Implantaten entwickelt, bei der neben der optimalen geometrischen Anpassung funktionelle Aspekte, wie Bewegungsfreiheitsgrade und wirkende Kräfte berücksichtigt werden sollen. Zentrales Thema des DFG-Sonderforschungsbereichs 760 „Biomechanik und Biologie der muskuloskelettalen Regeneration“ ist der Erwerb eines besseren Verständnisses des endogenen Wachstums von biologisch und mechanisch leistungsfähigem Knochengewebe sowie die Frage, welche Bedingungen zur optimalen Knochenheilung notwendig sind und wie diese im Rahmen einer medizinischen Versorgung hergestellt werden können.

Zur computergestützten Operationsplanung, insbesondere des vollständigen Kniegelenkersatzes, werden dreidimensionale Modelle der individuellen Anatomie des Knies benötigt, an die geometrische Implantatmodelle angepasst und deren Funktion in der Bewegung unter Berücksichtigung wirkender Kräfte (Hebel-, Muskel- und Zugkräfte) simuliert und getestet werden können. Ziel unseres Teilprojektes ist es, Segmentierungsverfahren und -werkzeuge zu entwickeln, die es erlauben, die anatomischen Strukturen des Knies (Knochen, Knorpel, Ansatzflächen von Bändern, Sehnen und Muskeln) sowie die für biomechanische Simulationen notwendigen Parameter (Rotationszentren und -achsen) aus den verfügbaren Bilddaten zu extrahieren (Abbildung 2.9) und diese in Form von geometrischen FE-Modellen und geeigneten Randbedingungen für die biomechanische Simulation bereitzustellen (siehe auch Abschnitt 2.2.5 auf Seite 67).

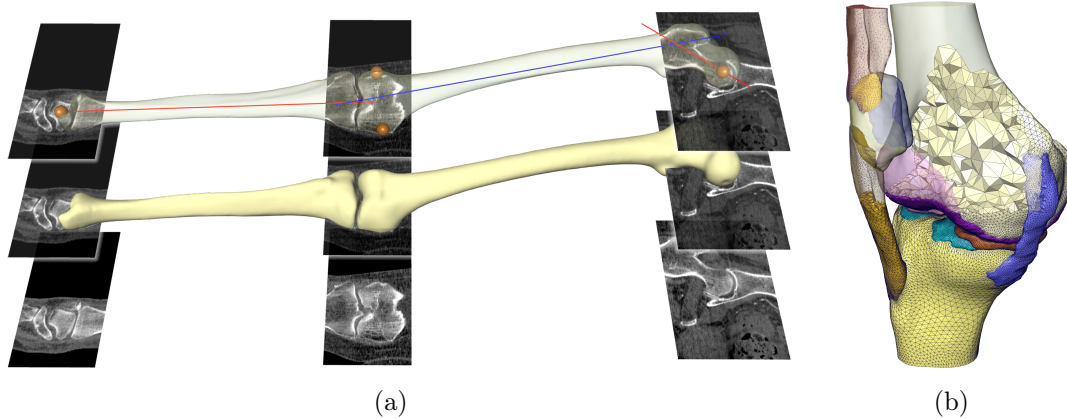


ABBILDUNG 2.9: (a) Von unten nach oben: Partielle CT-Daten werden zur Extraktion von patientenspezifischen geometrischen Anatomiemodellen genutzt, aus denen sich biomechanisch relevante Landmarken und Parameter ableiten lassen. (b) Rekonstruktion eines Volumengitters aller relevanten anatomischen Strukturen des Knies für die FE-Simulation.

Für die Bestimmung einer optimalen, belastungsstabilen Frakturversorgung müssen die auftretenden Kräfte und Bewegungsfreiheitsgrade an individuellen Patientenmodellen für unterschiedliche Belastungsszenarien simuliert werden. Ein wesentliches Ziel der Frakturversorgung ist, für den Heilungsprozess förderliche Bewegungen im Frakturspalt zuzulassen und nachteilige zu vermeiden. Voraussetzung für die Simulation sind patientenspezifische Modelle der kompletten Beinanatomie, die aus medizinischen Bilddaten geometrisch rekonstruiert werden müssen (Abbildung 2.10). Zu diesem Zweck werden im Teilprojekt C4 des SFB 760 grundlegende Verfahren für die automatisierte Rekonstruktion von komplexen anatomischen Strukturen unter Berücksichtigung ihrer Lagebeziehungen entwickelt (Abschnitt 2.2.5 auf Seite 66). An robusten und schnellen numerischen Verfahren für die biomechanische Simulation wird im Teilprojekt C5 geforscht

(siehe Abschnitt 2.2.3 auf Seite 48).

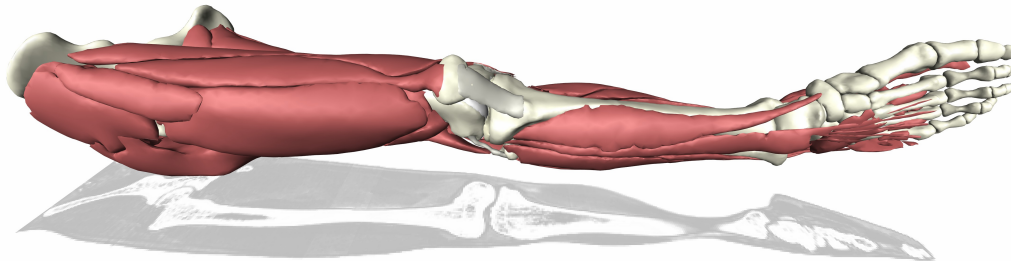


ABBILDUNG 2.10: Patientenspezifische Rekonstruktion von Knochen, Muskeln, Sehnen und Bändern.

Modellgestützte Therapieplanung für die MKG-Chirurgie

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Peter Deuffhard, Martin Weiser, Hans-Christian Hege, Hans Lamecker, Antonia Wittmers

Kooperationspartner: Anders Westermarck, Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden; Kurt Schicho, Rolf Ewers, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Medizinische Universität Wien, Österreich; Enno Barth, Kim Goliberzuch, Nils-Claudius Gellrich, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Medizinische Hochschule Hannover; Max Zinser, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie der Universität zu Köln

Für die Planung chirurgischer Knochensegmentverlagerungen und Knochendefekt-rekonstruktionen an dreidimensionalen Patientenmodellen unter Berücksichtigung der funktionellen und ästhetischen Rehabilitation [15, 18] wurden im Berichtszeitraum neue Konzepte erarbeitet, die statistische 3D-Formmodelle nutzen. Ziel ist es, auf Basis gemittelter Formen normal ausgeprägter anatomischer Strukturen und deren statistisch relevanten Formvariationen Rekonstruktionsvorschläge bereitzustellen. Unter Kenntnis einer normal ausgeprägten Anatomie, die partiell an individuelle pathologische Gegebenheiten eines Patienten angepasst wird, lassen sich chirurgische Rekonstruktionsvorschläge generieren, die als Grundlage für die präoperative Planung und das Implantat- bzw. Transplantatdesign dienen. Bislang wurden im Rahmen von Machbarkeitsstudien über eine relativ geringe Stichprobenzahl statistische Formmodelle der knöchernen Augenhöhle [8], des Unterkiefers [16] und des kindlichen Neurokraniums [9] erstellt. Perspektivisch soll für den gesamten menschlichen Schädel ein nach Altersgruppe und Geschlecht differenziertes statistisches Formmodell erzeugt werden. Zu diesem Zweck werden in Kooperation mit klinischen Partnern in Hannover und Köln relevante CT-Daten aus dem verfügbaren Bestand ausgesucht und verarbeitet

(Abbildung 2.11). Im Rahmen der praktischen Modellerstellung werden die erforderlichen Software-Werkzeuge kontinuierlich weiterentwickelt.

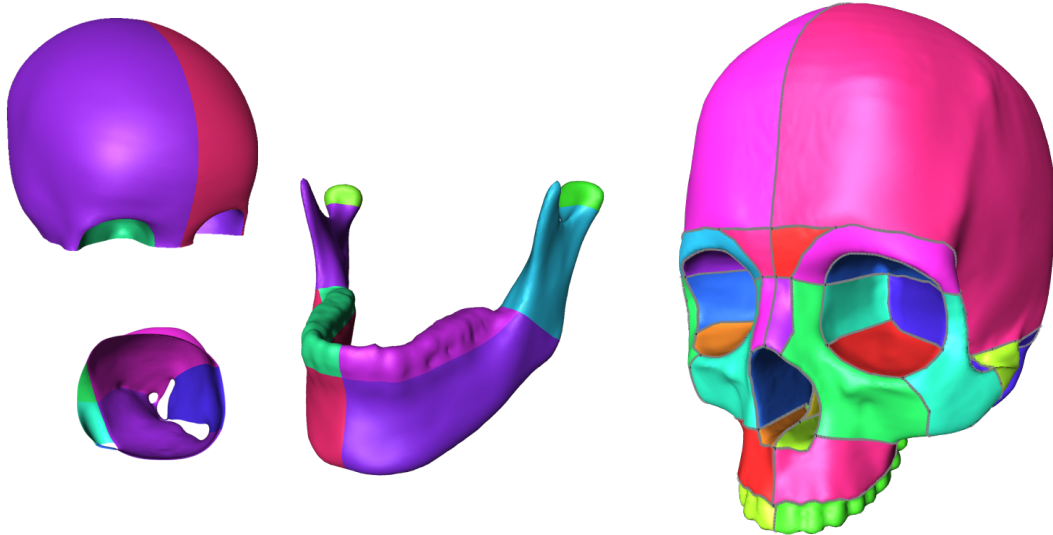


ABBILDUNG 2.11: Gebietszerlegung zur Korrespondenzbestimmung zwischen anatomischen Strukturen für die Erstellung statistischer 3D-Formmodelle (siehe auch Abschnitt 2.2.7).

Für die korrekte Modellierung einer Weichgewebedeformation nach geplanter Knochenverlagerung werden in der Arbeitsgruppe *Computational Medicine* nicht-lineare Deformationsmodelle in Kombination mit geeigneten Lösern untersucht. Eine in diesem Zusammenhang erforderliche Validierung kann z. B. über den Vergleich der Simulation mit realen Ergebnissen erfolgen. Dazu ist vorgesehen, im Rahmen einer Studie mit der Universitätsklinik Wien ca. zehn klinische Fälle zu planen und die prognostizierten Ergebnisse anhand der operativen Ergebnisse quantitativ zu überprüfen.

Planung von rhinochirurgischen Eingriffen unter Berücksichtigung der individuellen Nasenatmung

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Michael Zilske, Kai Pöthkow, Bertram Wölk
Kooperationspartner: Thomas Hildebrandt, Asklepios-Klinik Birkenwerder; Alexander Steinmann, Peter Bartsch, CFX Berlin Software GmbH; Werner Heppt, Rainer Weber, Klinikum Karlsruhe, HNO-Klinik; Ines Putz, 3D-Labor am Institut für Mathematik, TU Berlin

Förderung: HNO-Klinik, Städtisches Klinikum Karlsruhe

In der HNO-Heilkunde nimmt die Therapie rhinologischer Probleme einen breiten Raum ein. Dazu gehören zum Beispiel Nasenatmungsbehinderung, Beeinträchtigung des Geruchssinnes, Kopfschmerzen, Schnarchen, rezidivierende bzw. chronische Sinusitiden und pulmonologische Erkrankungen [7, 6]. Ein physiologischer

Atemstrom durch die Nase ist die Voraussetzung für wirksame olfaktorische und immunologische Prozesse sowie einen intakten Geruchssinn. Die Nase hat neben der funktionellen aber auch eine wichtige ästhetische Bedeutung. Die Rhinochirurgie hat somit einen dualen Charakter – sie muss funktionellen *und* ästhetischen Aspekten gleichermaßen gerecht werden. Präoperative Befunde einzuschätzen und die Auswirkungen chirurgischer Veränderungen der inneren und äußeren Nase präzise vorherzusagen ist daher eine besondere Herausforderung.

Dem komplizierten Bau der Nasenhaupthöhle und des angegliederten Nasennebenhöhlensystems entsprechend sind auch die Strömungsmuster sehr komplex. Das im Vorjahr entwickelte Referenzmodell der oberen Atemwege stellt eine ideale Voraussetzung für die Analyse von Strömungsphänomenen bei der Nasenatmung in Abhängigkeit von der individuellen Anatomie dar. Es umfasst die gesamte Nasenhaupthöhle, die Nasennebenhöhlen sowie den prä- und postnasalen Strömungsbereich. Zu Anschauungszwecken für HNO-Kongresse wurde das Nasenmodell sowohl maßstabsgetreu als auch vergrößert in einem 3D-Printverfahren am 3D-Labor der TU Berlin gefertigt.

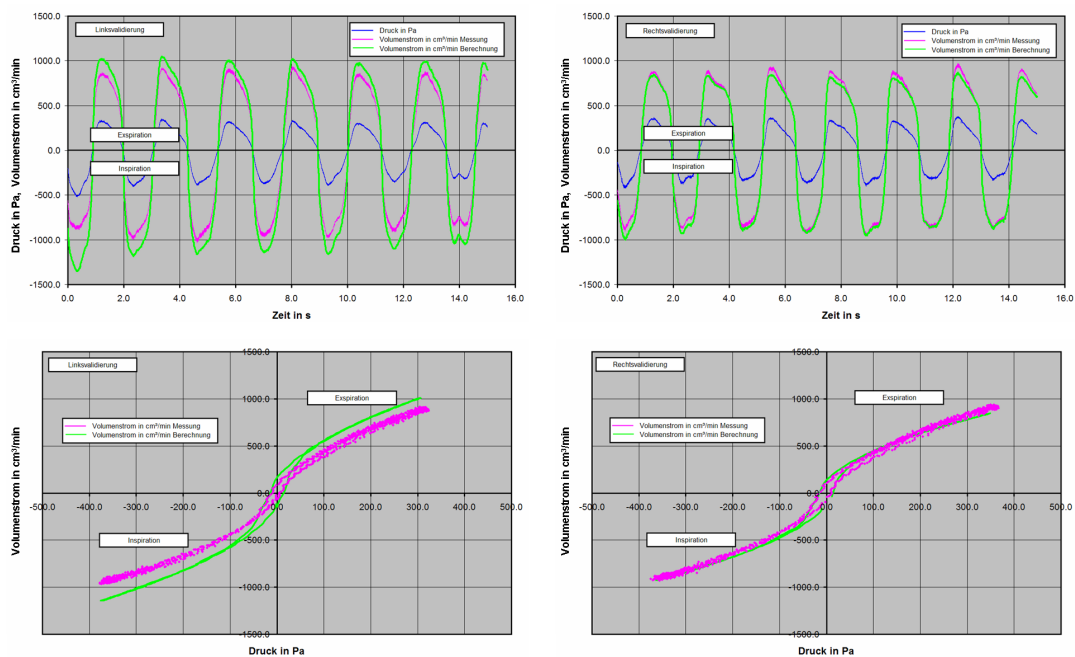


ABBILDUNG 2.12: Links- und rechtsseitiger Vergleich der Simulation (grün) mit der rhinomanometrischen Messung (pink): oben: Druck und Volumenstrom über die Zeit, unten: Volumenstrom über den Druck.

Im Berichtszeitraum erfolgten auf Basis des anatomischen Referenzmodells transiente Strömungsberechnungen über mehrere Atemzyklen mit ANSYS-CFX [13]. Das geometrische Modell zur FE-Analyse wurde mit der Software Amira erstellt [19]. Nach einer Validierung der Simulation anhand von rhinomanometrischen

Messwerten (Abbildung 2.12) kann davon ausgegangen werden, dass das Nasenmodell ein repräsentatives, pathophysiologisch ungestörtes Strömungsmuster liefert [17]. In einer weiteren Untersuchung erfolgte die Analyse der Nasenströmung unter Berücksichtigung von Vorgaben zu Druck, Temperatur und relativer Luftfeuchte (Abbildung 2.13). Die numerische Lösung der gemittelten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Enthalpie geschah unter Berücksichtigung von Diffusion und Konvektion im Volumen und im Wandübertragungsbereich. Der CFD-Simulation liegt dabei eine räumliche und zeitliche Diskretisierung zweiter Ordnung sowie ein SST-Zweigliedungs-Turbulenzmodell mit automatischen Wandfunktionen zugrunde.

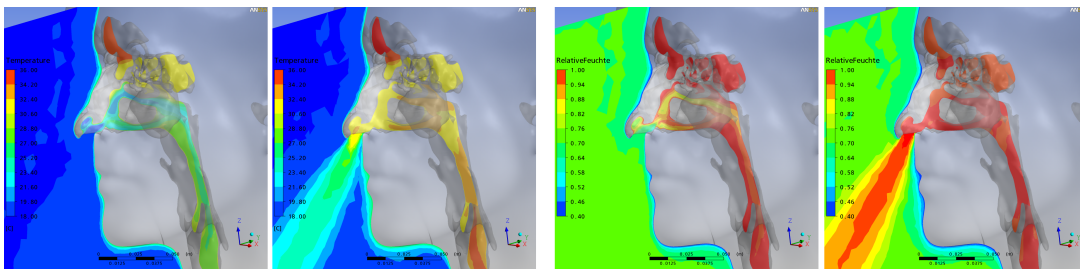


ABBILDUNG 2.13: Links: Temperatur (18-36° C), rechts) relative Feuchte (40-100 %) der Atemluft bei Einatmung und Ausatmung.

Mittelfristig sollen partikelbeladene Strömungen untersucht werden. Die Simulationsergebnisse sollen z. B. Aufschluss über die korrekte Verabreichung von Medikamenten durch die Nase geben. Langfristig wird es durch die technische Entwicklung auch möglich sein, Strömungsberechnungen bei Fluid-Struktur-Wechselwirkungen, d. h. bei veränderlicher Geometrie durchzuführen, etwa um Effekte an der Nasenklappe zu untersuchen. Fernziel, nach genauer Analyse einer normalen Nasenströmung anhand des Referenzmodells, ist die *patientenbezogene* Simulation und Analyse einer Nasenströmung auf Basis medizinischer Bilddaten. Auf diese Art sollen Mediziner in allen Phasen der Therapie – Diagnostik, Planung und Evaluierung der Behandlungsergebnisse – unterstützt werden.

Mehrskalenmodellierung der Perfusion

Bearbeitet von: Martin Weiser, Andre Massing, Susanne Gerber

Kooperationspartner: J. Gellermann, P. Wust (Charité), Carlo D'Angelo (EPFL Lausanne)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1

Bei der Simulation der Krebstherapie-Hyperthermie spielt die Durchblutung (Perfusion) des Gewebes aufgrund der hohen Wärmekapazität eine thermisch dominante Rolle. Ein möglichst genaues Perfusionsmodell ist daher Voraussetzung für eine quantitativ verlässliche Therapieplanung. Die bisher verwendete Bio-Wärmeleitungsgleichung modelliert im wesentlichen den Wärmeaustausch im Ka-

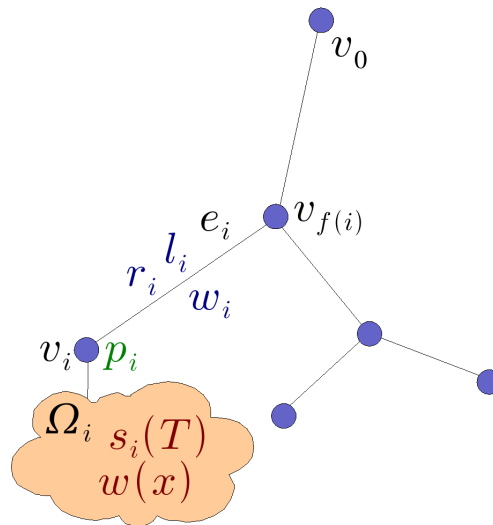


ABBILDUNG 2.14: Gefäßbaum mit versorgtem Gewebegebiet. Die Flußbilanz hängt ab von Größen, die Adersegmenten (Radius, Länge, Durchfluß), Verzweigungspunkten (Druck, Adjazenz) und Versorgungsgebieten (Temperatur, Perfusion) zugeordnet sind.

pillarbeit und ignoriert mittelgroße Blutgefäße komplett, ebenso die Flußrichtung des Blutes in großen Adern und interregionale Kopplungen der Durchblutungsstärke.

Im Berichtszeitraum wurde das Augenmerk auf zwei Punkte eines integrierten Mehrskalensmodells der Perfusion gerichtet. Zum einen wurden die Arbeiten am hierarchischen Perfusionsmodell zur Beschreibung des klinisch beobachteten Steal-Effekts fortgesetzt. Die lokale Temperaturabhängigkeit des peripheren Widerstands führt dabei zu einer regionalen Umverteilung des Blutflusses innerhalb des Gefäßbaums (siehe Abbildung 2.14). Erste Simulationen bestätigen die Vermutung, dass die interregionale Koppelung neue Möglichkeiten der Therapieoptimierung eröffnet.

Zum anderen wurde im Rahmen einer Diplomarbeit [11] die thermische Einbettung einer mittelgroßen Ader als 1D-Objekt in umliegendes Gewebe analysiert. Von der zugrundeliegenden Advektions-Diffusions-Gleichung und dem Erhalt des Masseflusses ausgehend, erhält man eine Grenzgleichung mit distributionellem Advektionsterm. Überraschenderweise ist dieser jedoch thermisch wirkungslos. Dennoch konnte gezeigt werden, dass im vorgesehenen Einsatzbereich, wenn die Elementgröße den eigentlichen Aderradius übersteigt, die FE-Diskretisierung der distributionellen Grenzgleichung eine sehr gute Approximation an die Ausgangsgleichung darstellt.

Schnelle und zuverlässige Multilevel-Algorithmen für die orthopädische Operationsplanung

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Rainald Ehrig, Corinna Klapproth

Kooperationspartner: Georg Duda, Norbert Haas, Georg Bergmann, Markus Heller, Bill Taylor, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin; Ralf Kornhuber, Oliver Sander, Leo Schmidt, FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik und DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A2; Rolf Krause, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Förderung: Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration – From Functional Assessment to Guided Tissue Formation, DFG-Sonderforschungsbereich 760

Im vergangenen Jahr wurden die Arbeiten des Teilprojekts 7 der Klinischen Forschergruppe „Biomechanik und Biologie der Knochenheilung“ innerhalb des neugegründeten SFBs 760 fortgesetzt. Das Projekt C5, in dem die wissenschaftlichen Ziele weiterverfolgt werden, wird wie bisher in einer Kooperation zwischen dem ZIB und dem Lehrstuhl von Ralf Kornhuber durchgeführt.

Einen Schwerpunkt der Arbeiten am ZIB bildeten im Berichtszeitraum die theoretische Fortentwicklung und robuste Implementation der mathematischen Methoden zur detaillierten Analyse von Gelenkbewegungen. Diese Werkzeuge sollen jetzt im Ganglabor des neu errichteten „Centrums für Sportmedizin und Sportwissenschaft Berlin“ (CSSB) im Routinebetrieb eingesetzt werden. Die interdisziplinäre Einrichtung der Humboldt-Universität und der Charité umfasst die Bereiche Sportwissenschaft, Sportmedizin, Prävention und Rehabilitation.

Mathematisch wurden die Methoden dahingehend erweitert, dass jetzt auch Bewegungen analysiert werden können, die sich durch überlagerte Rotationen um drei orthogonale Gelenkachsen ohne gemeinsamen Schnittpunkt beschreiben lassen.

Das nun zur Verfügung stehende Protokoll umfasst die folgenden Schritte: Berechnung optimierter fester Markerkonfigurationen mittels orthogonaler Distanzregression (OCST, Optimal Common Shape Technique) mit Gewichtung der Marker entsprechend ihrer Stabilität (Two step ODR), Bestimmung der Gelenkparameter mit Hilfe der symmetrischen Methoden SCORE und SARA, gegebenenfalls unter Verwendung patientenspezifischer anatomischer Daten [3, 5].

Da eine solche umfassende Methodik, die alle Komponenten von der Markerplatzierung bis zur dynamischen Analyse der Gelenkbewegungen und zuverlässigen Rekonstruktion der Segmentpositionen beinhaltet, ein erhebliches wirtschaftliches Potential enthält, wurde das gesamte Verfahren zum Patent angemeldet.

Weitere Arbeitsschwerpunkte waren in Zusammenarbeit mit der Gruppe von Ralf Kornhuber die Entwicklung eines lokalen FE-Kniemodells und dessen Test anhand realer Bewegungsdaten sowie in Kooperation mit Günther Bergmann die

Entwicklung adäquater mathematischer Methoden zur Kalibrierung telemetrischer orthopädischer Implantate [1].

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Modellgestützte 3D-Operationsplanung für die Mittelohrchirurgie

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Heiko Seim, Martin Weiser, Rainer Roitzsch

Kooperationspartner: Gero Strauß, Andreas Dietz, Klinik und Poliklinik für Hals-, Nasen- Ohrenheilkunde, Universitätsklinikum Leipzig; Michael Gessat, Oliver Burgert, Dirk Bartz, Innovation Center Computer Assisted Surgery, Universität Leipzig; Jana Dornheim, Bernhard Preim, Institut für Simulation und Graphik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Die Tympanoplastik ist ein häufiger Eingriff in der Mittelohrchirurgie, bei dem Unterbrechungen bzw. Funktionsstörungen in der Gehörknöchelchenkette durch unterschiedliche Arten von Prothesen behandelt werden. Aufgrund der komplexen und filigranen Mittelohranatomie lassen sich solche Eingriffe allerdings sehr schwer planen. Typischerweise erfolgt die Diagnostik anhand von tomografischen Bilddaten und die Entscheidung über Art, Lage und Länge des Implantats wird zumeist erst während des Eingriffes getroffen. Untersuchungen zeigen jedoch, dass das auditive Operationsergebnis in großem Maße von der Wahl der Implantatgröße und der Positionierung des Implantats abhängt. Für die präoperative Planung dieses Eingriffs soll daher eine Computerunterstützung entwickelt werden, die die Auswahl eines geeigneten Implantattyps und dessen sinnvolle Positionierung unter Berücksichtigung der optimalen Schalleitung ermöglicht [2, 4].

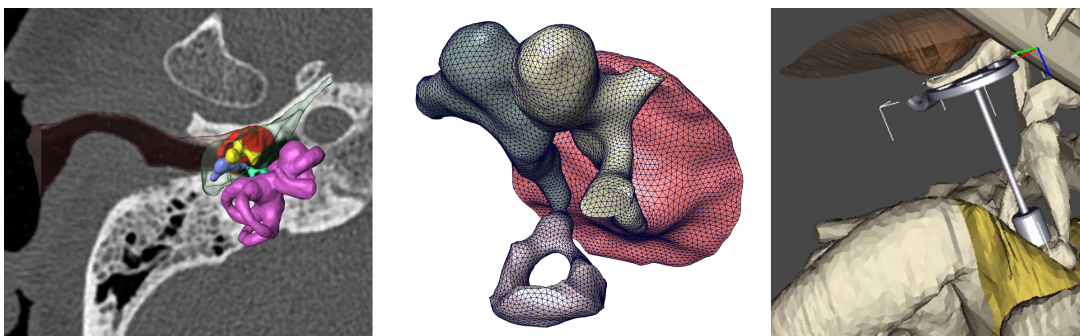


ABBILDUNG 2.15: Links: Mittelohrrekonstruktion aus hochaufgelösten CT-Daten des Felsenbeins, Mitte: Ossikelkette (Steigbügel, Amboss und Hammer) und Trommelfell, rechts: Total Ossicular Replacement Prothesis (TORP) zwischen Trommelfell und Steigbügelplatte.

Computergestützte Rekonstruktion von Knochenspanplastiken zur Therapie von Glenoidranddefekten

Bearbeitet von: Heiko Seim, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege

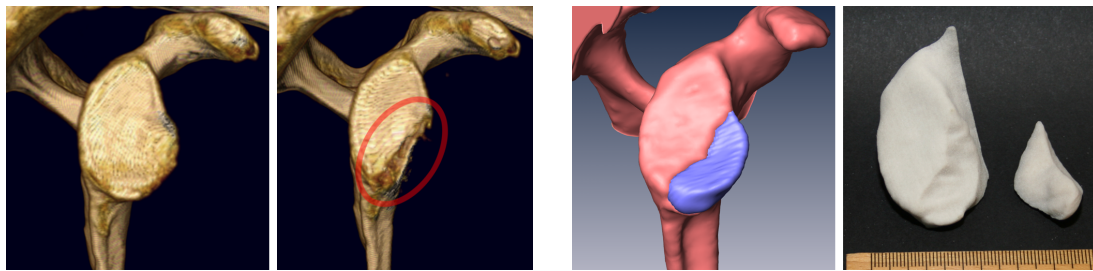
Kooperationspartner: Gerd Diederichs, Institut für Radiologie, Charité Campus Charité Mitte, Berlin; Markus Scheibel, Klinik für Unfallchirurgie, Charité, Campus Virchow-Klinikum, Berlin; Ines Putz, 3D-Labor, Institut für Mathematik, Technische Universität Berlin

Nach wiederholter Schulterluxation kommt es häufig zu knöchernen Randdefekten der Schultergelenkpfanne, die mittels einer Knochenspanplastik arthroskopisch oder auch offen versorgt werden (siehe Abbildung 2.16a). Dabei wird üblicherweise ohne spezielle Planung ein Stück des Beckenkammknochens entnommen und der Defekt damit gedeckt. Der Knochenspan verhindert zwar eine weitere Luxation des Schultergelenkes doch ist er in der Regel nicht sehr passgenau und verursacht in der Folge oft neue Beschwerden. Ziel dieser Kooperationsstudie ist es, zu zeigen, dass eine computergestützte Planung des Eingriffes zu einer verbesserten Passgenauigkeit des Knochenspans führt und damit die aus einer ungenauen chirurgischen Rekonstruktion resultierenden Beschwerden für den Patienten reduziert werden.

Im Berichtszeitraum wurde ein einfaches Verfahren entwickelt, das es ermöglicht, den fehlenden Knochenspan über die Spiegelsymmetrie der gesunden kontralateralen Schultergelenkpfanne zu rekonstruieren. Der komplette Planungs- und Rekonstruktionsprozess, vom Einlesen der klinischen Bilddaten bis hin zum Export des für die Fertigung geeigneten STL-Formates, erfolgte mit der Software Amira. Es konnte gezeigt werden, dass mittels computergestützter Rekonstruktionsplanung der Zustand vor Auftreten des Randdefektes mit hoher Genauigkeit wiederhergestellt werden kann und das Verfahren für den klinischen Einsatz geeignet wäre. Das Rekonstruktionsergebnis (Schultergelenk und Knochenspan) wurde mittels eines 3D-Druckverfahrens aus dem Prototypenbau in Originalgröße an der TU Berlin gefertigt und kann dem Chirurgen als Schablone dienen (siehe Abbildung 2.16b). Die Vision wäre, den rekonstruierten Glenoidspan direkt aus einem biokompatiblen Material zu fertigen und als Implantat zu nutzen.

Therapieplanung in der Leberchirurgie (Hans Lamecker, Dagmar Kainmüller, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard; Kooperation: Thomas Lange, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Campus Berlin-Buch)

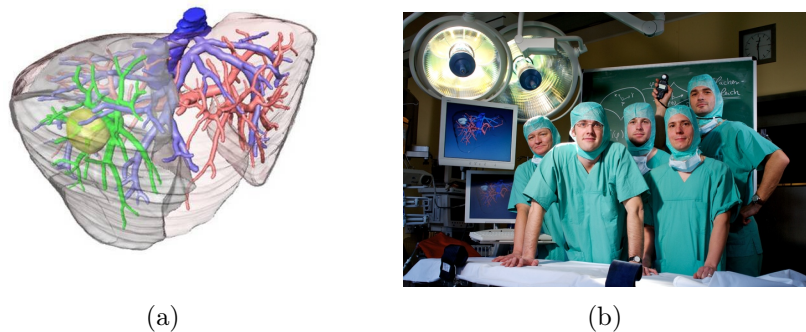
Das Ziel in der onkologischen Leberchirurgie ist, einen Tumor bei bestmöglicher Schonung des gesunden Lebergewebes vollständig zu entfernen. Dabei spielt die relative Lage des Tumors zu wichtigen Blutgefäßen der Leber eine entscheidende Rolle. In enger Kooperation mit der Charité Berlin entwickeln wir Methoden sowohl zur präoperativen Planung von Tumorresektionen in der Leber als



(a) Gesundes und pathologisches Glenoid.

(b) Rekonstruktion des Knochenspanes.

ABBILDUNG 2.16: (a) Glenoidranddefekt (rot) als typischer Befund nach multipler Luxation der Schulter. (b) Unsere virtuelle Rekonstruktion der Glenoidrandplastik und der dazugehörige 3D-Druck.



(a)

(b)

ABBILDUNG 2.17: (a) Lebermodell mit Parenchym, Gefäßbaum und Tumor als Grundlage für die präoperative Planung einer Resektion. (b) Projektteam aus Mitarbeitern der Charité, des Matheon und des ZIB.

auch zu deren Umsetzung im Operationssaal (siehe Abbildung 2.17). Im Berichtszeitraum wurde zum einen die automatische Segmentierung der Leber aus kontrastverstärkten CT-Daten verbessert (siehe Abschnitt 2.2.5 Seite 65), zum anderen die Registrierung präoperativ erzeugter Gefäßmodelle mit intraoperativ aufgenommenem 3D-Ultraschall weiterentwickelt [10].

Parameteridentifizierung in der Hyperthermie (Martin Weiser; Kooperation: P. Wust, J. Gellermann, J. Nadobny, Charité, Campus Virchow-Klinikum; S. Volkwein, Universität Graz, Österreich; Förderung: DFG-Einzelförderung)

Die zuvor am Phantom entwickelte Anpassung der mittels FE- oder FDTD-Methode berechneten Antennenprofile durch MR-Thermometriemessungen in der Hyperthermie wurde im Berichtszeitraum auf reale Therapien übertragen und

dort erfolgreich erprobt [14]. Die Datenlage ist dabei unbefriedigend, weil im Fettgewebe keine Thermometrie möglich ist und an Gewebegrenzen Bewegungsartefakte die Meßdaten überlagern. Dennoch konnte eine signifikante Erhöhung der Tumortemperatur erzielt werden.

Gegen Ende des Berichtszeitraumes begannen wir, den Effekt der Wärmeleitung in die Adaption der Antennenprofile einzubeziehen. Da die Adaption online erfolgen soll, ist eine SQP-basierte Identifizierung unter Berücksichtigung der Bio-Wärmeleitungsgleichung nicht möglich. Es wurde eine Approximation entwickelt, deren Zusatzberechnungen im Vergleich zum bisherigen Vorgehen vollständig vor der Messung erfolgen kann. Dies erlaubt den Einsatz während der Therapie. Die Implementierung und praktische Erprobung ist Fokus der aktuellen Arbeit.

Im Hinblick auf die schnelle Online-Identifizierung der Perfusion und die Nachoptimierung der Antennenparameter zum Aufbau einer Regelschleife wurde im Rahmen einer Diplomarbeit [12] begonnen, die Eignung von Modellreduktion mit POD (Proper orthogonal decomposition) zur Diskretisierung der Bio-Wärmeleitungsgleichung zu untersuchen. Dabei konnten durch die Verwendung von Gauß-Maßen die bisher für endlichdimensionale Parameter durchgeführte Analysis auf Funktionenräume ausgeweitet werden.

Publikationen

- [1] G. Bergmann, F. Graichen, A. Rohlmann, A. Bender, R. Ehrig, P. Westerhoff und B. Heinlein, *Design and calibration of load sensing orthopaedic implants*, Journal Biomech. Eng., in press (2007).
- [2] J. Dornheim, S. Born, S. Zachow, M. Gessat, D. Wellein, G. Strauß, B. Preim und D. Bartz, *Bildanalyse, Visualisierung und Modellerstellung für die Implantatplanung im Mittelohr*, Simulation and Visualization 2008 (Hauser et al., Hg.), SCS Publishing House e. V., 2008, S. 139–154.
- [3] R. Ehrig, W. Taylor, G. Duda und M. Heller, *A survey for formal methods for determining functional joint axes*, Journal of Biomechanics (2007), Nr. 40, 2150–2157.
- [4] M. Gessat, S. Zachow, O. Burgert und H. Lemke, *Geometric meshes in medical applications - Steps towards a specification of geometric models in DICOM*, Int. J. of Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS) (2007), 440–442.
- [5] M. Heller, C. König, F. Graichen, S. Hinterwimmer, R. Ehrig, G. Duda und W. Taylor, *A new model to predict in vivo human knee kinematics under physiological-like muscle activation*, Journal of Biomechanics, in press (2007), Nr. 40, S45–S53.

-
- [6] W. Heppt, T. Hildebrandt, A. Steinmann und S. Zachow, *Aesthetic and function in rhinoplasty*, Springer Journal: Eur Arch Otorhinolaryngol **264** (Suppl 1), RL 126 (2007), 307.
- [7] T. Hildebrandt, S. Zachow, A. Steinmann und W. Heppt, *Innovation in der Funktionell-Ästhetischen Nasenchirurgie: Rhino-CFD*, Face: Int. Mag. of Orofacial Esthetics **1** (2007), Nr. 2, 20–23.
- [8] H. Lamecker, L. Kamer, A. Wittmers, S. Zachow, T. Kaup, A. Schramm, H. Noser und B. Hammer, *A method for the three-dimensional statistical shape analysis of the bony orbit*, Proc. Computer Aided Surgery Around the Head (Freysinger et al., Hg.), Pro Business Verlag, 2007, S. 94–97.
- [9] H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege und M. Zöckler, *Surgical treatment of craniosynostosis based on a statistical 3D-shape model: First clinical application*, Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery **1** (2006), Nr. 1, 253–254.
- [10] T. Lange, M. Hünnerbein, S. Eulenstein, S. Beller, P. M. Schlag und H. Lamecker, *A distance measure for non-rigid registration of geometrical models to intensity data*, Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery **2**, Suppl. 1 (2007), 204–206.
- [11] A. Massing, *1D-Reduktion thermal signifikanter Aderstränge in der Hyperthermie-Modellierung*, Diplomarbeit, FU Berlin, 2007.
- [12] I. Schräer, *Modellreduktion in der regionalen Hyperthermie mittels POD*, Diplomarbeit, FU Berlin, Fachbereich Mathematik, 2008.
- [13] A. Steinmann, P. Bartsch, S. Zachow und T. Hildebrandt, *Breathing easily: Simulation of airflow in human noses can become a useful rhinosurgery planning tool*, ANSYS Advantage **2** (2008), Nr. 1, 30–31.
- [14] M. Weihrauch, P. Wust, M. Weiser, J. Nadobny, S. Eisenhardt, V. Budach und J. Gellermann, *Adaptation of antenna profiles for control of MR guided hyperthermia (HT) in a hybrid MR-HT system*, Med. Phys. **34** (2007), Nr. 12, 4717–4725.
- [15] S. Zachow und P. Deuffhard, *Computergestützte Planung in der kraniofazialen Chirurgie*, Face: Int. Mag. of Orofacial Esthetics **2** (2008), Nr. 1, 43–49.
- [16] S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz und M. Stiller, *Reconstruction of mandibular dysplasia using a statistical 3D shape model*, Proc. Computer Assisted Radiology and Surgery (Lemke et al., Hg.), Elsevier, 2005, S. 1238–1243.

- [17] S. Zachow, A. Steinmann, T. Hildebrandt und W. Heppt, *Understanding nasal airflow via CFD simulation and visualization*, Proc. Computer Aided Surgery Around the Head (Freysinger et al., Hg.), Pro Business Verlag, 2007, S. 173–176.
- [18] S. Zachow, M. Weiser und P. Deuffhard, *Modellgestützte Operationsplanung in der Kopfchirurgie*, Bd. 13, Health Academy, 2008.
- [19] S. Zachow, M. Zilske und H.-C. Hege, *3D reconstruction of individual anatomy from medical image data: Segmentation and geometry processing*, 25. ANSYS Conference & CADFEM Users' Meeting, 2007, Proc. CD 2.12.15.

2.2.4 Biologische Systeme

Seit vielen Jahren werden am ZIB Forschungsprojekte aus dem Anwendungsbereich Biologie bearbeitet – mit steigender Tendenz. In diesem Jahresbericht werden daher Projekte, die am ehesten der Biologie zuzuordnen sind, erstmals in einem eigenen Schwerpunkt zusammengestellt.

Cortex in silico

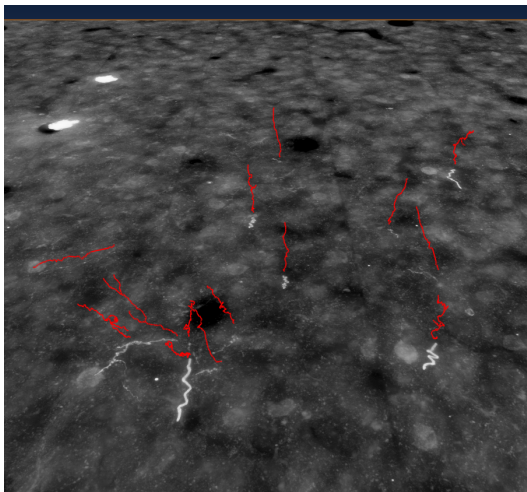
Bearbeitet von: Vincent Dercksen, Maria Gensel, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Marcel Oberländer, Bert Sakmann, Alexander Borst, Max-Planck-Institut für Neurobiologie, Martinsried

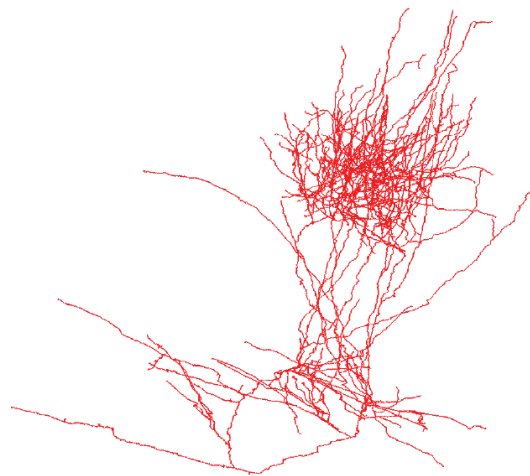
Förderung: Max-Planck-Institut für Neurobiologie

Im 2007 neu gestarteten Projekt *Cortex in silico* werden Methoden und Werkzeuge entwickelt, die es ermöglichen, aus 3D-Bildern ausgewählter Gehirnregionen die darin befindlichen neuronalen Netze zu rekonstruieren. Das Ziel der kooperierenden Neurobiologen ist es, bestimmte Entscheidungsprozesse, die sich im Gehirn vollziehen, besser zu verstehen. Dazu wird die Signalverarbeitung der an der Entscheidung beteiligten neuronalen Netze simuliert.

Im ersten Jahr des Projektes wurden Werkzeuge zur schnellen Rekonstruktion einzelner Neuronen entwickelt. Die Rekonstruktion verläuft wie folgt: Zuerst wird das Neuron mit einem Farbstoff gefüllt und der Gehirnteil, in dem das Neuron liegt, in dünne histologische Schichten geschnitten. Die einzelnen Schichten werden mit einem Mikroskop in sehr hoher Auflösung aufgenommen, wobei durch Verschiebung der Fokalebene ein 3D-Volumen pro Schnitt entsteht. Die 3D-Bilder werden in einem nächsten Schritt automatisch segmentiert [6]. Am ZIB wurde eine Softwareumgebung entwickelt, die es erlaubt, fehlerhafte Elemente aus dem Segmentierungsergebnis zu entfernen, die Schnitte interaktiv auszurichten, und schließlich die Endpunkte der Axon- und Dendritabschnitte miteinander zu verbinden, so dass ein komplettes Neuron entsteht (siehe Abbildung 2.18). Während frühere Verfahren auf 2D-Projektionen beruhten, wird nun in 3D gearbeitet. Da-



(a) Maximum-Intensitätsprojektion eines einzelnen histologischen Schnitts und die daraus rekonstruierten neuronalen Strukturen.



(b) ein komplett rekonstruiertes Neuron.

ABBILDUNG 2.18: Rekonstruktion der 3D-Neurongeometrie aus mikroskopischen Bilddaten. Daten: Marcel Oberländer (Max-Planck-Institut für Neurobiologie, Martinsried).

durch kann der Benutzer die relative Lage und die Konnektivität der Axon- und Dendritabschnitte besser beurteilen. Dieses führt zu einer erheblichen Qualitätssteigerung und Beschleunigung der Rekonstruktion.

Räumlich-zeitliche Modelle von biologischen Objekten

Bearbeitet von: Vincent Dercksen, Maria Gensel, Chavdar Papazov, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Cornelia Brüß, Sabine Gubatz, Udo Seiffert, Winfriede Weschke, Leibniz-Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung Gatersleben (IPK)

Förderung: BMBF-Verbundprojekt Bioinformatics Center Gatersleben-Halle

Ziel des Projektes *Erkennung und Analyse räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster* ist es, effektive und effiziente Algorithmen und Werkzeuge zur Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschritten zu entwickeln. Auf Basis solcher 3D-Modelle soll ein vierdimensionaler Atlas erstellt werden, in den experimentelle Daten, wie z. B. Genexpressionsmuster, raumzeitlich referenziert eingetragen werden können. Die Bilddaten sind aufgrund der aufwendigen manuellen Präparation mit vielerlei Artefakten behaftet. Außerdem macht die Größe der Datensätze Out-of-core-Verfahren erforderlich.

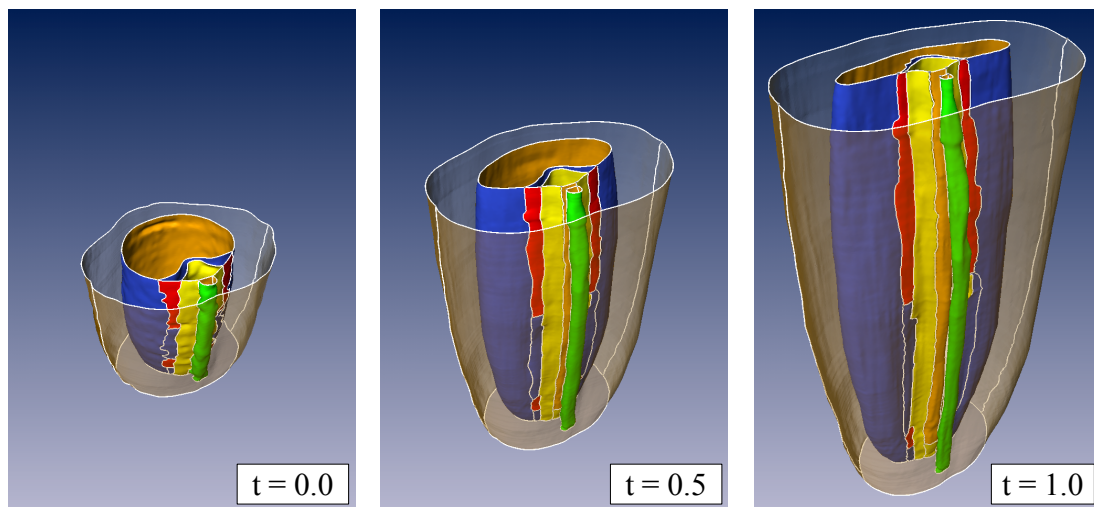


ABBILDUNG 2.19: Zeitliche Interpolation ($t = 0,5$) zwischen Gerstensamenmodellen ($t = 0,0$ und $t = 1,0$) aus unterschiedlichen Wachstumsstadien und mit unterschiedlicher Topologie.

In den vergangenen Jahren wurden Methoden und Software entwickelt, um 3D-Pflanzenmodelle aus großen Stapeln histologischer Schnitte zu rekonstruieren und dann experimentelle Daten in solche Modelle zu integrieren [1]. Im abschließenden Jahr des Projektes stand die Erstellung eines vierdimensionalen Atlanten im Mittelpunkt. Ziel war, durch Interpolation zwischen 3D-Oberflächenmodellen, die Gerstensamen unterschiedlichen Alters repräsentieren, einen räumlich-zeitlichen Atlas des sich entwickelnden Gerstenkorns zu erstellen.

Ein Hauptproblem ist, dass sich zwei zeitlich aufeinanderfolgende Modelle topologisch unterscheiden können, z. B. durch die Entstehung eines neuen Gewebes. Zur Lösung dieses Problems wurde eine am ZIB entwickelte Methode zur Interpolation zwischen zwei 3D-Oberflächenmodellen [12] so erweitert, dass auch bestimmte topologische Änderungen berücksichtigt werden können [7]. Abbildung 2.19 zeigt einen mit dieser Methode berechneten Interpolationsschritt ($t = 0,5$) zwischen Modellen eines vier Tage ($t = 0,0$) und eines sieben Tage ($t = 1,0$) alten Gerstensamens. Eine topologische Änderung die man hier beobachten kann, ist die Ablösung des Gefäßes (grün) von der Projektion (gelb).

Mathematische Modellierung in der gynäkologischen Endokrinologie

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Isabel Reinecke

Kooperationspartner: Tim Wintermantel, Bayer Schering Pharma AG

Auch wenn die Systembiologie zurzeit ein vielbeachtetes Feld darstellt, spielte die mathematische Modellierung des weiblichen Hormonzyklus bislang keine große Rolle. Ziel dieses Projektes ist es, ein Modell zu entwickeln, das alle wesentli-

chen biochemischen Prozesse dieses Regelkreises umfasst. Bei der Modellierung des weiblichen Hormonzyklus wurden die wesentlichen Vorgänge auf den drei Ebenen Hypothalamus, Hypophyse und Ovarien sowie die Interaktionen dieser drei Kompartimente betrachtet [9]. Zurzeit liegen 49 Delaydifferentialgleichungen für die Dynamik von Hormonen, Rezeptoren, Enzymen, Follikelmassen und dem GnRH-Pulsgenerator im Hypothalamus vor (linke Seite der Abbildung 2.20). Des weiteren wurde das Modell für die Wirkung der Anti-Baby-Pille weiterentwickelt.

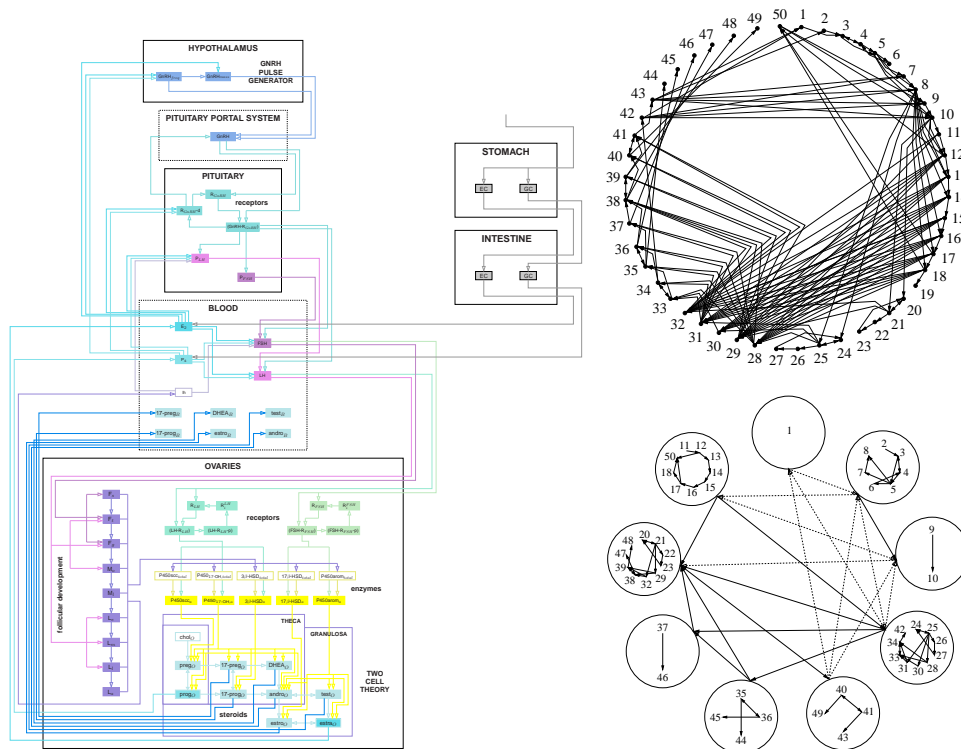


ABBILDUNG 2.20: Links: Schema des komplexen Modells für den weiblichen Hormonzyklus inklusive der Anti-Baby-Pille. Rechts: Modell als Graph (oben) und Modellzerlegung (unten).

Bei der Modellierung von physiologischen Prozessen im Menschen tritt häufig eine große Zahl an unbekanntem Parametern auf, so auch im Fall des weiblichen Hormonzyklus. Die Parameterschätzung stellt daher ein nicht leicht zu lösendes Problem dar. Daher wurde eine Methode entwickelt, die es ermöglicht, unter Einbeziehung von experimentellen Daten das Modell zu zerlegen. Durch diese Modellzerlegung kann das Problem in mehrere Probleme kleinerer Dimension aufgeteilt werden (rechte Seite der Abbildung 2.20). Dies hat im Fall des weiblichen Hormonzyklus dazu geführt, dass die maximale Dimension der resultierenden Modellteile nur ein Fünftel der Gesamtdimension beträgt [10].

Eine Kooperation mit Bayer Schering Pharma, bei der die Modellierungsansätze verwendet und bestimmte Fragestellungen anhand des Modells untersucht werden sollen, ist in Vorbereitung.

Dynamische FEM-Simulation der elektrischen Herzmuskelanregung

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch

Kooperationspartner: Luca Pavarino, Universität Mailand, Italien; Piero Colli Franzone, Universität Pavia, Italien; Glenn Lines, Simula, Norwegen, Jens Lang, Technische Universität Darmstadt

Die Arbeiten im Berichtszeitraum konzentrierten sich auf die Beschleunigung der Simulation der elektrischen Aktivität im Herzmuskel. Insbesondere wurde das Modell des Kammerflimmerns von Aliev und Panfilov an einer realitätsnahen Herzgeometrie betrachtet. Die Entwicklung des Transmembranpotentials wird dabei durch eine partielle (PDE) und punktweise gewöhnliche (ODE) Differentialgleichungen beschrieben.

Die numerischen Rechnungen wurden mit der am ZIB entwickelten Software KAR-DOS durchgeführt, die sich durch eine auf einer Rothe-Methode basierende adaptive Steuerung in Zeit und Ort in diesem Beispiel als effizient erwies. Die Rechenzeit für angemessene Genauigkeiten war allerdings noch unerwünscht hoch [2]. Daher wurden mehrere neue Ansätze untersucht, die eine Verkürzung der Rechenzeit ermöglichen.

Die bereits im Vorjahr begonnene Entkopplung von PDE und ODE („Splitting“-Methode) wurde intensiv untersucht. Dieser Zugang entspricht einem „Deliberate sparsing“ in der assoziierten Steifigkeitsmatrix und erzielte etwa 30 % Einsparung an Rechenzeit ohne Verlust von Genauigkeit. Die anderweitig vorgeschlagene punktweise Propagation der ODEs spart zwar Rechenzeit, entspricht jedoch einem „Mass lumping“ und führt zu rund viermal größeren Approximationsfehlern. Die Anwendbarkeit hängt also entscheidend von der Dynamik und räumlichen Regularität der entsprechenden ODE-Komponente ab.

Die Verwendung quadratischer Elemente mit eingebettetem Fehlerschätzer bringt deutliche Effizienzgewinne gegenüber der bisherigen Methode mit linearen Ansatzfunktionen, allerdings erst bei höheren Genauigkeitsanforderungen an die Simulation.

Eine weitere Effizienzsteigerung konnte durch Multi-Threading zur Parallelisierung einiger Code-Abschnitte erzielt werden. Die Skalierung ist jedoch durch die Speicherbandbreite beschränkt, so dass nur bis zu vier Prozessoren sinnvoll verwendet werden können.

Ein Schwerpunkt der Arbeiten bestand in der Entwicklung punktwiser nicht-linearer Skalierungen der Reaktions-Diffusions-Gleichungen, so dass die skalierten Größen mit geringerem Aufwand diskretisierbar sind (siehe [11]). Durch die Beschränkung auf punktwise Skalierungen liegt der durch die Transformation verursachte zusätzliche Rechenaufwand bei nur rund 10%. Diese Technik wurde zunächst an strukturell ähnlichen Modellproblemen getestet, wobei eine Verkürzung der Rechenzeit um einen Faktor zwischen 3 und 10 erzielt werden konnte (siehe Abbildung 2.21).

Die genannten Methoden lassen sich auch kombiniert einsetzen, eine genauere Quantifizierung ihrer Effizienz ist in Arbeit.

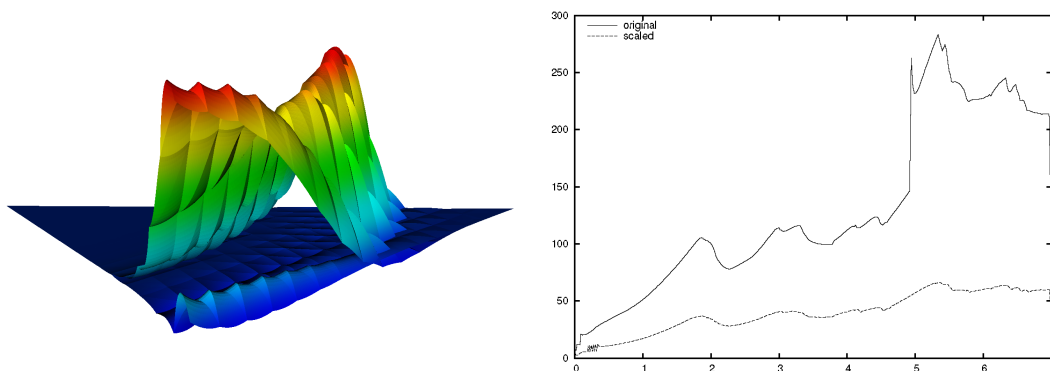


ABBILDUNG 2.21: FE-Diskretisierungsfehler der ursprünglichen und der skalierten Lösung (links). Anzahl der Gitterknoten für ursprüngliche und skalierte Problemformulierung über die Zeit.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Neuroanatomische Atlanten (Anja Kuß, Hans Lamecker, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege; Kooperation: Randolf Menzel, Jürgen Rybak, Kerstin Neubert, Daniel Münch, Institut für Neurobiologie, FU Berlin; Angela Kurylas, Fachbereich Biologie-Neurobiologie/Ethologie, Philipps-Universität Marburg; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Neuroanatomische Atlanten bilden Referenzsysteme, mit deren Hilfe Neurobiologen sowohl Daten verschiedener Individuen oder verschiedener Entwicklungsstufen eines Individuums als auch Daten unterschiedlicher Bildgebungsmodalitäten in Bezug setzen können. Nach der Entwicklung von Werkzeugen zur Generierung von populationsbasierten Atlanten von Insektengehirnen [3] liegt nun der Fokus auf Verfahren zur Erweiterung bestehender Atlanten und deren Einsatz in der neurobiologischen Forschung. Insbesondere werden strukturelle, geometrische und ontologische Hierarchien eingeführt und die Bildsegmentierung verbessert.

Mit Hilfe der Werkzeuge wurde ein Atlas aus zehn Heuschreckengehirnen erstellt, der 34 rekonstruierte Neuropile beinhaltet. Für die Erweiterung des Bienengehirnatlanten wurden Methoden entwickelt, mit deren Hilfe Innervationsgebiete von Neuronen räumlich analysiert wurden und eine feinere Strukturierung eines Neuropils, des Calyx, bestätigt werden konnte.

Da die Segmentierung der Bilddaten weiterhin einen großen zeitlichen Aufwand erfordert, wurde parallel ein modellbasierter Ansatz zur Segmentierung des Calyx aus konfokalen Mikroskopiedaten entwickelt [5, 4].

Rekonstruktion subzellulärer Einheiten (David Günther, Daniel Baum, Hans-Christian Hege; Kooperation: Wolfgang Baumeister, Alexander Rigort, Max-Planck-Institut für Biochemie, Martinsried; Förderung: Max-Planck-Institut für Biochemie)

Ziel des Projektes ist es, in hochauflösenden 3D-Bilddaten, die mit Hilfe der Kryo-Elektronentomographie (Kryo-ET) gewonnen werden, subzelluläre Strukturen zu indentifizieren – möglichst automatisch und mit geringem Zeitaufwand. Das Verfahren soll genutzt werden, um viele Datensätze statistisch und biologisch auszuwerten. Eine automatische Erkennung der Strukturen ist mit herkömmlichen Methoden nicht möglich, da die Kryo-ET-Bilddaten ein sehr kleines Signal-Rausch-Verhältnis und schwache Kontraste aufweisen.

Im Fokus steht zunächst die Identifizierung der Aktinfilamente. Die Filamente bilden ein Netzwerk, das die Stabilität der Zelle garantiert; weiterhin ist es der Zelle möglich, sich durch Auf- und Abbau der Filamente fortzubewegen. Neben den Aktinfilamenten ist die Struktur der Zellmembran und deren Interaktion mit dem Aktinnetzwerk während des Bewegungsvorgangs von Interesse.

Im Berichtszeitraum wurde eine erste Methode zur automatischen Erkennung von Aktinfilamenten entwickelt. Da die Filamente eine geringe Krümmung und eine konstante Dicke aufweisen, können sie als stückweise lineare Strukturen angenommen werden, und mittels eines Zylinders lokal approximiert werden. An Hand von datenabhängigen Parametern werden Korrelationsfelder und ein Vektorfeld erzeugt, aus denen sich die wahrscheinlichsten Filamente extrahieren lassen.

Neben den ersten Rekonstruktionen von Aktinnetzwerken wurden mittels semi-automatischer Verfahren erste Segmentierungsergebnisse für die Zellmembran gewonnen. Basierend auf einem manuell erzeugten Gerüst, das die wesentliche Form der Zelle beschreibt, wird eine krümmungsminimierende Hülle berechnet. Diese entspricht bei geeigneter Wahl des Gerüsts der Zellmembran.

Die im Berichtszeitraums geleisteten Vorarbeiten zur Bildsegmentierung führten zu einem vom MPI für Biochemie finanzierten Kooperationsprojekt für die Dauer von zunächst zwei Jahren, beginnend ab 2008.

Analyse von simulierter Knochenremodellierung (Steffen Prohaska, Charlotte Winkler, Jan Nietfeld; Kooperation: Peter Fratzl, Peter Saporin, Richard Weinkamer, MPI für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Golm; Gisela Beller und Dieter Felsenberg, Zentrum für Muskel- und Knochenforschung Charité, Campus Benjamin Franklin; Jürgen Kurths und Norbert Marwan, Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik an der Universität Potsdam; Klaus Klaushofer, Paul Roschger, Nadja Fratzl-Zelman, Jörg Haller, Zandieh Shahi, Ludwig Boltzmann Institute für Osteologie, Wien, Österreich; Förderung: European Space Agency (ESA), European Space Research and Technology Center (ESTEC))

Es wurde ein skelettbasiertes Analyseverfahren entwickelt, das es erlaubt, topologische Veränderungen in zeitabhängigen Volumendaten mit netzwerkartiger Struktur in einer Visualisierung darzustellen. Die Ausgangsdaten sind Ergebnis einer vereinfachten Simulation von Knochenremodellierung, die die prinzipiellen Veränderungen im Knochen über seine gesamte Lebensdauer erfasst. Topologische Veränderungen, wie zum Beispiel das Zusammenwachsen von zuvor getrennter Knochenfeinstruktur, können durch das entwickelte Analyseverfahren, das auf den in [8] vorgestellten Verfahren zur Skelettberechnung basiert, dargestellt werden.

Bildbasierte Validierung eines Modells für Zelladhäsion (Steffen Prohaska; Kooperation: Sebastian Schmidt, Ulrich Schwarz, Center for Modelling and Simulation in the Biosciences (BIOMS), Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg; Franziska Klein, Zoologisches Institut 1, Universität Karlsruhe (TH))

Es wurde ein semi-automatisches Verfahren entwickelt, um ein Modell für die sich ausbildende dreidimensionale Zellform bei Zelladhäsion an konfokale Bilddaten solcher Zellen anzupassen. Ausgangspunkt sind zum einen Bilddaten von Zellen, die sich an ein nanotechnologisch hergestelltes Gerüst angeheftet haben und zum anderen ein geometrisches Modell für die dreidimensionale Zellform, die sich unter Berücksichtigung des Aktinskeletts ausbildet. Um die optimalen Modellparameter zu finden, werden die Anheftungspunkte manuell in den Bilddaten markiert. Anschließend werden Variationen des geometrischen Modells für mögliche Zellformen bei den gewählten Anheftungspunkten erzeugt und visuell mit den Bilddaten verglichen.

Publikationen

- [1] V. Dercksen, C. Brüß, D. Stalling, S. Gubatz, U. Seiffert und H.-C. Hege, *Towards automatic generation of 3D models of biological objects based on serial sections*, Visualization in Medicine and Life Sciences (L. Linsen, H. Hagen und B. Hamann, Hg.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008, S. 3–25.
- [2] P. Deuffhard, B. Erdmann, R. Roitzsch und G. Lines, *Adaptive finite element simulation of ventricular dynamics, to appear*, J. Computing and Visualiza-

- tion in Science (2007).
- [3] A. Kuß, H.-C. Hege, S. Krofczik und J. Börner, *Pipeline for the creation of surface-based averaged brain atlases*, WSCG'2007 Full Paper Proceedings (J. Rossignac und V. Skala, Hg.), 2007, S. 17–24.
 - [4] K. Neubert, *Model-based autosegmentation of brain structures in the honeybee, *apis mellifera**, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 2007.
 - [5] K. Neubert, H. Lamecker, H.-C. Hege, R. Menzel und J. Rybak, *Model-based autosegmentation of brain structures in the honeybee using statistical shape models*, Proc. 8th Int. Congr. of Neuroethology (ICN), 2007.
 - [6] M. Oberländer, R. M. Bruno, B. Sakmann und P. Broser, *Transmitted light brightfield mosaic microscopy for 3D tracing of single neuron morphology*, Journal of Biomedical Optics **12** (2007), Nr. 6.
 - [7] C. Papazov, V. J. Dercksen, H. Lamecker und H.-C. Hege, *Visualizing morphogenesis and growth by temporal interpolation of surface-based 3D atlases*, International Symposium on Biomedical Imaging, accepted, 2008.
 - [8] S. Prohaska, *Skeleton-based visualization of massive voxel objects with network-like architecture*, Dissertation, Universität Potsdam, 2007.
 - [9] I. Reinecke und P. Deuffhard, *A complex mathematical model of the human menstrual cycle*, Journal of Theoretical Biology **247** (2007), 303–330.
 - [10] I. Reinecke und P. Deuffhard, *Model development and decomposition in physiology*, Handbook of Research on Systems Biology Applications in Medicine (A. Daskalaki, Hg.), accepted.
 - [11] M. Weiser, *Pointwise Nonlinear Scaling for Reaction-Diffusion-Equations*, Report 07-45, ZIB, 2007.
 - [12] M. Zöckler, D. Stalling und H.-C. Hege, *Fast and intuitive generation of geometric shape transitions*, The Visual Computer **16(5)** (2000), 241–253.

2.2.5 Bild- und Signalanalyse

Fast allen anwendungsorientierten Forschungsprojekten liegen empirische Daten zugrunde. Entsprechend groß ist die thematische Vielfalt der Arbeiten im Bereich Bild- und Signalanalyse: Die Arbeiten behandeln mathematische, algorithmische und anwendungsspezifische Probleme. Die Bildgebungsverfahren reichen von Millimeterwellenradar in der Meteorologie über Mikro-CT-Daten in der Materialforschung bis hin zu Röntgenbildern, Computertomographie- und Magnetoenzephalographie-Daten in der Medizin.

Klassifizierung von Wolkenstrukturen

Bearbeitet von: Gerd Teschke, Kornelia Pönitz

Kooperationspartner: Gerhard Peters, Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg; Hans-Jürgen Kirtzel, Meteorologische Meßtechnik GmbH, (Metek)

Förderung: Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AIF)

Der Schwerpunkt dieses Projektes ist die Analyse der Mikrostruktur von Wolken-schichten.

Ausgehend von einer Kooperation mit dem DWD im Jahre 2006 wurde zusammen mit der Firma Metek (Produzent meteorologischer Messtechnik, siehe Abbildung 2.22) ein AIF-Projekt mit dem Ziel der Entwicklung eines Targetklassifizierungsverfahrens beantragt. Im Mai 2007 begann dieses Projekt mit der Einstellung einer neuen Mitarbeiterin.

Ausgehend von einer zugrundeliegenden Arbeit [12] zur Targetklassifizierung der gemessenen Atmosphärenpartikel wurde ein Verfahren zur Bestimmung von sekundären Parametern, wie z. B. Flüssigwassergehalt, Schmelzschichten etc., entwickelt. Dabei kamen sogenannte Support-Vektor-Klassifikatoren zum Einsatz. Das Projekt wird im April 2009 abgeschlossen.

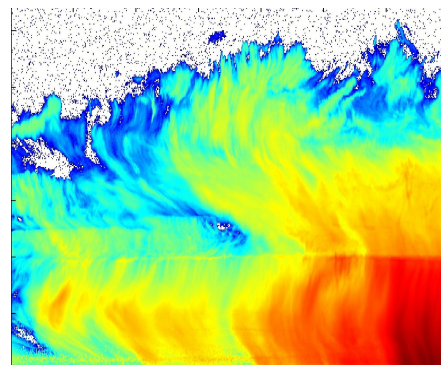
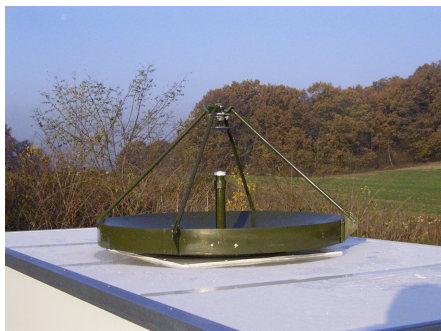


ABBILDUNG 2.22: Links: Wolkenradargerät MIRA36 der Firma Metek, rechts: Wolkenradarmessung (sichtbar: Schmelzschicht und Niederschlag).

Inverse Probleme – Algorithmen zur Farbbild-Rekonstruktion

Bearbeitet von: Gerd Teschke, Mariya Zhariy, Matthias Rätsch

Kooperationspartner: Ronny Ramlau, Johann-Radon-Institut, Linz, Österreich; Massimo Fornasier, Princeton University, Princeton, USA

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

Farbbild-Rekonstruktion kann als inverses Problem formuliert werden: gegeben seien eine vollständige Grauwertbilddarstellung (möglicherweise deformiert oder „geblurred“ und eine zufällige partielle Farbwertbildinformation; gesucht wird eine vollständige Farbbildrekonstruktion, siehe Abbildung 2.23). Nachdem im Jahr



ABBILDUNG 2.23: Rekonstruktion italienischer Fresken: Farbfragmente (links), vollständige Farbrekonstruktion (rechts).

2006 erste grundlegende mathematische Methoden entwickelt wurden [10, 13], bestand der Fokus im Berichtszeitraum in der Weiterentwicklung der Verfahren und der Anwendung auf konkrete Probleme [2, 3].

Ein relevantes und interessantes Beispiel ist die Restauration alter italienischer Fresken. In einer engen Zusammenarbeit mit M. Fornasier ist es gelungen, unsere Verfahren auf diese Problemstellung sehr erfolgreich anzuwenden. Das mathematische Vorgehen und die vollständigen numerischen Ergebnisse können in [4] eingesehen werden.

Inverse Rekonstruktion fötaler Gehirnaktivitäten

Bearbeitet von: Gerd Teschke, Mariya Zhariy

Kooperationspartner: Ronny Ramlau, Johann-Radon-Institut, Linz, Österreich; Hubert Preissl, MEG-Zentrum, Universität Tübingen; Chris Lowery, University of Arkansas for Medical Sciences, Little Rock, USA

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

Die Rekonstruktion der fötalen Gehirnaktivität ist ein Forschungsgebiet in der pränatalen Diagnostik in dem unsere Arbeitsgruppe seit einigen Jahren mit dem MEG-Zentrum Tübingen kooperiert. Das Ziel besteht darin, anhand von gemessenen Magnetfeldern die fötale Gehirnaktivität zu rekonstruieren.

Mathematisch ist hierbei die Poissongleichung mit Neumann-Randbedingungen zu lösen. In den ersten numerischen Versuchen, das inverse Problem zu lösen, hat sich herausgestellt, dass die Einbindung von geometrischen Nebenbedingungen (Bereich Shape-Optimierung) wesentlich bessere Rekonstruktionsresultate liefert. Sinnvolle geometrische Nebenbedingungen können auf verschiedene Weise integriert werden: zum einen als sogenannte Initialgeometrie über MRI-Messungen (die zeitlich vorab gewonnen werden), zum anderen durch Setzen einer geometrischen Mumford-Shah-Randbedingung (die einen Strafterm in Bezug auf die rekonstruierte Topologie/Geometrie darstellt).

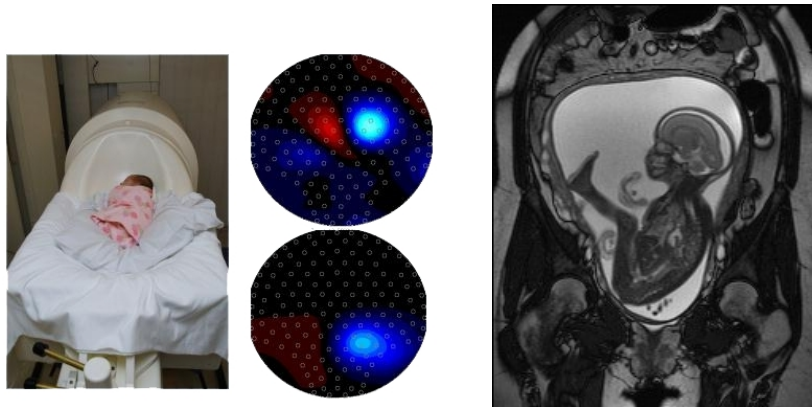


ABBILDUNG 2.24: fötale Gehirnaktivität topografisch auf Sensorarrayfeld abgebildet (links) und geometrische Zusatzinformation (rechts).

Dieses Vorgehen wird gegenwärtig erfolgreich in einem 2007 bewilligten DFG-Projekt (gemeinsames DFG/FWF-Projekt mit dem RICAM in Linz) umgesetzt.

Modellbasierte Bildsegmentierung der Leber aus CT-Daten

Bearbeitet von: Dagmar Kainmüller, Hans Lamecker, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Thomas Lange, Peter Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch

Förderung: DFG-Sonderforschungsbereich 760; DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Die automatische Segmentierung des Lebergewebes aus kontrastverstärkten CT-Daten spielt eine wichtige Rolle in der computergestützten Planung für die onkologische Leberchirurgie. Dieses Problem ist schwierig zu lösen, da die Intensitätswerte der Leber denen benachbarter Strukturen sehr ähnlich sein können und zudem die Form der Leber von Mensch zu Mensch sehr stark variieren kann. Daher wurde im Rahmen der 10. Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention-Konferenz (MICCAI 2007) [5] ein Wettbewerb zur Segmentierung der Leber aus CT-Daten ausgetragen. Das am ZIB entwickelte vollautomatische Verfahren [6] belegte dabei den ersten Platz und setzte sich gegen die internationale Konkurrenz durch.

Das Verfahren ist die Weiterentwicklung eines früheren am ZIB entwickelten halbautomatischen Verfahrens auf der Grundlage eines statistischen Formmodells der Leber [7]. Um die Genauigkeit der Segmentierung gegenüber der früheren Variante zu erhöhen, wurde erstens das statistische Formmodell der Leber erweitert (112 Trainingsdaten); zweitens wurde ein Freiform-Deformationsalgorithmus entwickelt, der dem Modell erlaubt, auch Formen anzunehmen, die im Formenraum

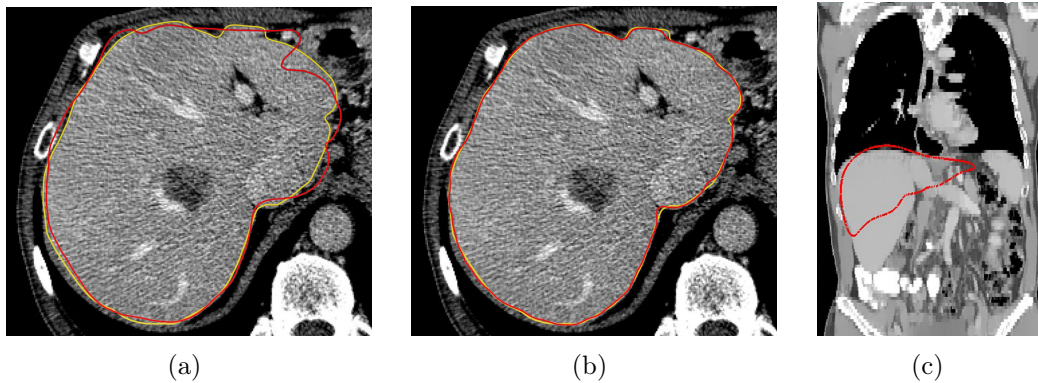


ABBILDUNG 2.25: (a) und (b): Goldstandardsegmentierung der Leber in gelb, automatische Segmentierung in rot. (a) Segmentierung mit dem statistischen Formmodell. (b) Genaueres Ergebnis durch Segmentierung mit dem Freiformmodell. (c) Automatische Initialisierung des Lebermodells (rot) unterhalb des rechten Lungenflügels.

des statistischen Formmodells nicht enthalten sind (siehe Abbildung 2.25a und 2.25b). Der Algorithmus lässt dazu beliebige überschneidungsfreie Deformation innerhalb einer vorgegebenen maximalen Abweichung vom statistischen Formmodell zu. Er ist unabhängig von der konkreten Anwendung und lässt sich somit auch auf andere Segmentierungsprobleme anwenden (wie im nächsten Abschnitt gezeigt). Drittens konnte auf Basis eines heuristischen Modells der Intensitätsverteilung der Leber und benachbarter Strukturen die Anpassungsstrategie des Modells an die CT-Daten deutlich verbessert werden. In diesem Modell werden nun auch große Tumore im Lebergewebe abgebildet. Zur vollständigen Automatisierung des Verfahrens wurde zum einen eine automatische Initialisierung des Lebermodells in den Bilddaten entwickelt, die auf der Erkennung des rechten Lungenflügels basiert (Abbildung 2.25c). Zum anderen wurde mittels einer Histogrammanalyse der CT-Daten eine automatische Schätzung aller für das Verfahren nötigen Parameter realisiert.

Geometrische Rekonstruktion der unteren Extremitäten aus medizinischen Bilddaten

Bearbeitet von: Dagmar Kainmüller, Hans Lamecker, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Markus Heller, Centrum für Muskuloskeletale Chirurgie (CMSC); Georg Duda, Georg Bergmann, Charité, Campus Mitte; Petra Knaus, Institut für Chemie-Biochemie der FU Berlin; Ralf Kornhuber, Institut für Mathematik der FU Berlin; Peter Fratzl, Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Gollm; Stefan Mundlos, Max-Planck-Institut für Molekulare

Genetik, Berlin; Andreas Lendlein, Institut für Polymerforschung am GKSS-Forschungszentrum, Teltow

Förderung: DFG-Sonderforschungsbereich 760

Ziel des im DFG-Sonderforschungsbereich 760 „Biomechanik und Biologie der muskuloskeletalen Regeneration“ am ZIB bearbeiteten Teilprojektes C4 ist die Entwicklung von Methoden zur patientenspezifischen geometrischen Rekonstruktion aller relevanten anatomischen Strukturen der unteren Extremitäten für die biomechanische Simulation (siehe auch Abschnitt 2.2.3). Dazu wurde im Berichtszeitraum ein Verfahren zur Feinanpassung eines Oberflächenmodells an Bilddaten implementiert (siehe 2.2.5), das bei unserem klinischen Partner erfolgreich für die automatisierte Segmentierung des Beckenknochens aus CT-Daten eingesetzt wird. Besonders im Bereich von Gelenken ist die Segmentierung von Knochen aus medizinischen Bilddaten jedoch problematisch, da aneinandergrenzende Knochen im Allgemeinen nicht durch einen starken Gradienten in den Bilddaten voneinander getrennt sind. Da an Gelenken allerdings häufig Pathologien auftreten, sind diese Bereiche bei der Bildanalyse von besonderem Interesse.

Daher wurde ein Verfahren zur gleichzeitigen Segmentierung mehrerer, an einem Gelenk aneinandergrenzender Knochen konzipiert und teilweise implementiert. Die Kopplung mehrerer Objekte ist durch Randbedingungen bezüglich ihrer gegenseitigen Lage realisiert. Das Verfahren soll nach Fertigstellung am Beispiel des Hüftgelenks (Acetabulum-Femurkopf) validiert werden.

Weiterhin wurde ein neues statistisches Formmodell des Beckenknochens konzipiert und erstellt (siehe Abbildung 2.26). Der Fokus lag hier auf einer genauen Darstellung der anatomisch besonders relevanten Regionen. Bei der Verwendung des Modells zur Segmentierung von Bilddaten erlaubt dies einen flexiblen Umgang mit pathologischen, beispielsweise nach Einsetzen einer Hüftgelenksprothese aufgenommenen, Daten.

Langfristig soll ein vollautomatisches System zur Rekonstruktion der Bein Knochen und weiterer, für die Dynamiksimulation relevanter, Strukturen aus medizinischen Bilddaten aufgebaut werden.

Rekonstruktion der Anatomie des Knies aus klinischen Bilddaten zur patientenspezifischen Anpassung von Implantaten

Bearbeitet von: Heiko Seim, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege, Hans Lamecker

Kooperationspartner: Mark Taylor, School of Engineering Sciences, University of Southampton Highfield, Vereinigtes Königreich; Markus Heller, Charité, Campus Virchow-Klinikum Edvard Valstar, Leiden University Medical Center, Niederlande; Manuel Doblaré, Universität Saragossa, Spanien; Argiris Kamoulakos, ESI Group S.A., Rungis, Frankreich; Andy Taylor, Finsbury Orthopaedics Ltd., Leatherhead, Vereinigtes Königreich; Nigel Lambert, Pera Innovation Ltd.,

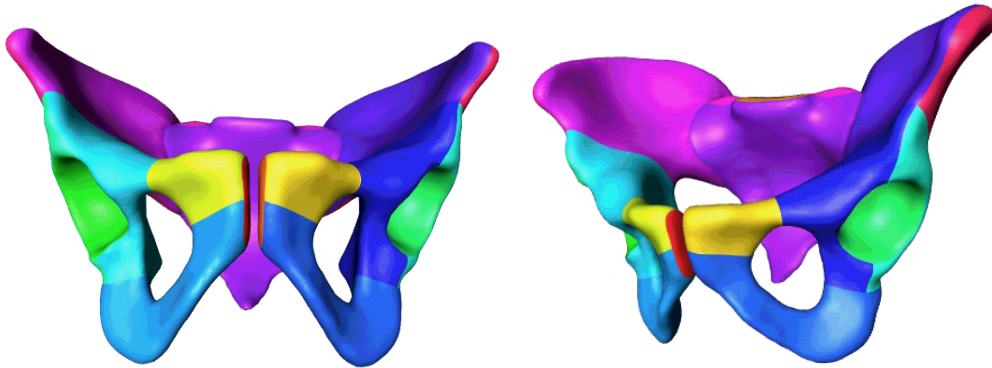


ABBILDUNG 2.26: Formmodell des Beckens. Die Oberfläche ist in 21 Regionen unterteilt. Rechtes und linkes Ilium sind an der Symphyse getrennt, ebenso kann das Sacrum getrennt von den beiden Iliumhälften betrachtet werden. Enthalten die Bilddaten implantierte Gelenkspfannen, so kann bei der Segmentierung mit dem statistischen Formmodell das Acetabulum mitsamt den umgebenden Regionen gesondert behandelt werden.

Leicestershire, Vereinigtes Königreich; Allan Ritchie, DePuy International Ltd., Leeds, Vereinigtes Königreich

Förderung: EU FP6 Projekt 27252 „DeSSOS“

Im Rahmen des EU-Projektes DeSSOS (Decision Support Software for Orthopedic Surgery) werden Probleme der computergestützten Therapieplanung für die orthopädische Chirurgie am menschlichen Knie bearbeitet (siehe Abschnitt 2.2.3). Die Grundlage einer solchen Planung bilden patientenspezifische anatomische Modelle und Parameter, die aus medizinischen Bilddaten extrahiert werden. Unsere Aufgabe ist die Entwicklung der hierfür notwendigen Methoden und Werkzeuge.

Im Berichtszeitraum konnten aus klinischen CT-Daten unserer Kooperationspartner der Universitäten Leiden, Southampton und des Universitätsklinikums Charité in Berlin statistische Formmodelle sämtlicher Kniegelenkknochen (Femur, Tibia, Patella und Fibula) erstellt werden. Diese Modelle bilden die Grundlage für einen Großteil der im Rahmen des DeSSOS-Projektes entwickelten Methoden.

Mit Hilfe der statistischen Formmodelle konnte ein Verfahren entwickelt werden, dass es erlaubt aus CT-Daten die Ansatzflächen von Bändern und Sehnen zu extrahieren [11]. Diese Strukturen verbinden die funktionellen Strukturen des Bewegungsapparates und nehmen somit bei biomechanischen Simulationen eine kritische Rolle ein. Eine möglichst genaue patientenspezifische Beschreibung der Ansatzflächen ist daher wünschenswert. CT-Daten erlauben dies, aufgrund ihrer geringen Kontrastierung für Weichgewebe, nur sehr ungenügend. Das neu entwickelte Verfahren als Initialisierung für einen bildbasierten Optimierungsschritt

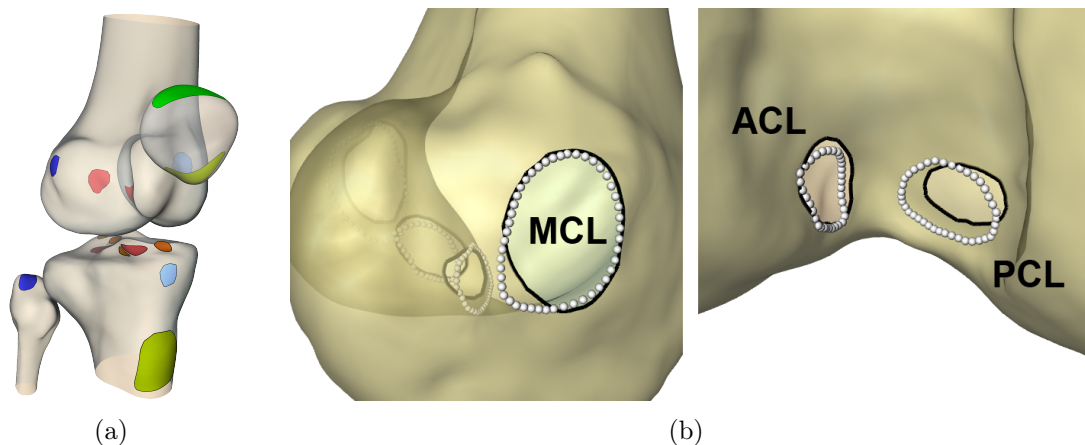


ABBILDUNG 2.27: (a) 3D-Formmodelle der knöchernen Knieanatomie mit Ansatzflächen von Bändern und Sehnen (b) Rekonstruktion von Ansatzflächen der Kreuz- und Seitenbänder. Das Ergebnis der automatischen Erkennung (gepunktet) nähert die manuell definierte Kontur gut an (schwarz).

statistische Formmodelle der Knochen auf denen die räumliche Lage der Ansatzflächen kodiert. Die Ansatzfläche auf der extrahierten Knochenoberfläche wird anhand der umgebenden Grauwerte verschoben (siehe Abbildung 2.27).

Weiterhin wurde damit begonnen, den Segmentierungsprozess zu automatisieren. Dazu wurde eine mehrstufige Anpassungsstrategie für knöcherne Strukturen erarbeitet. Nach grober manueller Initialisierung wird zunächst in einer relativ großen lokalen Umgebung nach einer möglichst genauen Passform für das Formmodell gesucht. Ist diese gefunden, wird der Suchraum nach und nach verkleinert, so dass am Ende auch sonst nur sehr schwer zu extrahierende pathologische Teilbereiche korrekt segmentiert werden. Derzeit wird an einem automatischen Initialisierungsschritt gearbeitet, der, zusammen mit der beschriebenen Anpassungsstrategie, eine vollautomatische Segmentierung der Knieknochen erlauben soll.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Konstruktion von Shearlet-Coorbit-Räumen und Banach-Frames (Gerd Teschke; Kooperation: Stephan Dahlke, Universität Marburg; Gabriele Steidl, Universität Mannheim; Gitta Kutyniok, Princeton und Stanford University, USA)

Die Analyse von geometrischen Strukturen in hochdimensionalen Daten ist gegenwärtig ein sehr aktuelles Forschungsfeld. Ausgehend von der Wavelet-Transformation wurden in den letzten Jahren diverse Verfeinerungen konstruiert (etwa die Curvelet- oder Ridgelet-Transformation). Als eine aufgrund ihres gruppentheoretischen Hintergrundes besonders ausgezeichnete Transformation hat sich die

Shearlet-Transformation als Werkzeug zur Detektion gerichteter geometrischer Strukturen etabliert. Schwerpunkt unserer Forschung war deshalb die Diskretisierung der kontinuierlichen Shearlet-Transformation. Ausgangspunkt war hierbei die klassische Coorbit-Theorie (nach Feichtinger und Gröchenig). Diese gestattet es, mit Techniken der Harmonischen Analysis Glattheitsräume und Frames zu konstruieren und entsprechende Approximationsresultate abzuleiten, siehe [1]. Aus Anwendungssicht hat man somit die Möglichkeit, Funktionen/Signale in Bezug auf ihre „geometrischen“ Grundbausteine bzw. Grundstrukturen zu analysieren, zerlegen und rekonstruieren.

Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Thorax aus 2D-Röntgenbildern

(Jalda Dworzak, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege, Stefan Zachow, Peter Deuffhard; Kooperation: Cristian Lorenz, Jens von Berg, Mathias Klinder, Philips Research Europe, Hamburg, Medical Imaging Systems; Förderung: Philips Research Europe, Hamburg)

Röntgenaufnahmen des Brustkorbes sind oftmals die einzige Grundlage für die Diagnose von Erkrankungen und Anomalien. Derzeit verwendete Diagnosemethoden, wie z. B. bildgebende Intervallstudien zur Untersuchung von Krankheitsverläufen, erfordern Vorwissen über Form und Lage der patientenspezifischen 3D-Geometrie eines in 2D-Röntgenaufnahmen abgebildeten Brustkorbes. Zur Abschätzung der 3D-Lage und 3D-Form des Thorax wurde ein Verfahren weiterentwickelt, welches die 3D-Form des Beckenknochens aus wenigen synthetischen Röntgenbildern extrahiert [8]. Das Rekonstruktionsverfahren basiert auf der Anpassung eines statistischen Formmodells an bestimmte Merkmale in den Röntgendaten. Dabei wird die Ermittlung der Geometrie und Patientenlage über die Maximierung eines Ähnlichkeitsmaßes zwischen Röntgenbild und Projektion des Formmodells erzielt. Es wurde ein statistisches Formmodell des Thorax erzeugt und die Anwendbarkeit des bestehenden Verfahrens auf die Thoraxanatomie untersucht. Die spezielle topologische und geometrische Beschaffenheit des Brustkorbes und die zusätzliche Ermittlung der Patientenlage erfordert eine Anpassung der Rekonstruktionsstrategie. Ansätze hierfür wurden erarbeitet.

Bildbasierte Analyse von Gefüge- und Porenstrukturen (Steffen Prohaska; Kooperation: Richard Binner, Ute Kalbe, Wolfgang Berger, Jürgen Goebels, Dietmar Meinel, Franz-Georg Simon, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM); Förderung: BAM)

In Vorarbeiten wurde belegt, dass sich die Verfahren zur Skelettberechnung aus [9] eignen, um den Porenraum von Bodenproben ausgehend von Mikro-CT-Bilddaten zu analysieren. Dabei sind verschiedene Parameter der Gefüge- und Porenstruktur von Interesse, um fundamentale Zusammenhänge bei Auswaschungsphänomenen besser zu begreifen. Die Analyse der Bilddaten liefert unter anderem die notwendigen Eingabedaten für Perkolationsmodelle. Ausgehend von Bilddaten, die

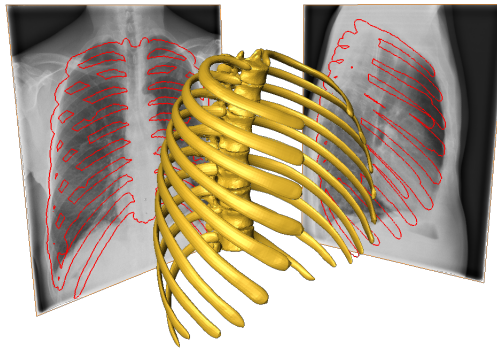


ABBILDUNG 2.28: Rekonstruktion des Thorax aus Röntgenbildern.

an der BAM aufgenommen wurden, gelang es mit Hilfe einer Skelettberechnung des Porenraums, Poren- und Porenengstellenpositionen und weitere geometrische Größen – wie Porenengstellendurchmesser – zu bestimmen.

Die Vorarbeiten mündeten in die Bewilligung der BAM für die Finanzierung eines gemeinsamen Forschungsprojekts, das ab Januar 2008 am ZIB bearbeitet wird.

Publikationen

- [1] S. Dahlke, G. Kutyniok, G. Steidl und G. Teschke, *Shearlet coorbit spaces and associated banach frames*, submitted (2007).
- [2] I. Daubechies, G. Teschke und L. Vese, *Iteratively solving linear inverse problems with general convex constraints*, *Inverse Problems and Imaging* **1** (2007), Nr. 1, 29–46.
- [3] I. Daubechies, G. Teschke und L. Vese, *On some iterative concepts for image restoration*, *Advances in Imaging and Electron Physics* **150** (2008).
- [4] M. Fornasier, R. Ramlau und G. Teschke, *A comparison of joint sparsity and total variation minimization algorithms in a real-life art restoration problem*, (under review) (2007).
- [5] T. Heimann, B. van Ginneken und M. Styner, *MICCAI workshop on 3d segmentation in the clinic*, 2007, <http://mbi.dkfz-heidelberg.de/grand-challenge2007/>.
- [6] D. Kainmüller, T. Lange und H. Lamecker, *Shape constrained automatic segmentation of the liver based on a heuristic intensity model*, *Proc. MICCAI Workshop 3D Segmentation in the Clinic: A Grand Challenge* (2007), 109–116.

- [7] H. Lamecker, T. Lange und M. Seebaß, *Segmentation of the liver using a 3D statistical shape model*, Report 04-09, ZIB, 2004.
- [8] H. Lamecker, T. H. Wenckebach und H.-C. Hege, *Atlas-based 3D-shape reconstruction from x-ray images*, Proc. Int. Conf. of Pattern Recognition (ICPR2006), Bd. Volume I, IEEE Computer Society, 2006, S. 371–374.
- [9] S. Prohaska, *Skeleton-based visualization of massive voxel objects with network-like architecture*, Dissertation, Universität Potsdam, 2007.
- [10] R. Ramlau und G. Teschke, *A Projection Iteration for Nonlinear Operator Equations with Sparsity Constraints*, Numerische Mathematik **104** (2006), 177–203.
- [11] H. Seim, H. Lamecker und S. Zachow, *Segmentation of bony structures with ligament attachment sites*, 2008, accepted for: Workshop Bildverarbeitung für die Medizin, Berlin, Apr. 6-8.
- [12] G. Teschke, U. Görzdorf, P. Körner und D. Trede, *A new approach for target classification in ka-band radar data*, Proc. ERAD Barcelona (2006).
- [13] G. Teschke und R. Ramlau, *An Iterative Algorithm for Nonlinear Inverse Problems with Joint Sparsity Constraints in Vector Valued Regimes and an Application to Color Image inpainting*, submitted (2006).

2.2.6 Visuelle Strömungsanalyse

Bei den Arbeiten im Bereich der Strömungsanalyse stehen Verfahren im Vordergrund, die über eine bloße Darstellung der Strömung hinausgehen und stattdessen die wesentlichen Strukturmerkmale von Strömungen extrahieren und visualisieren.

Merkmalsbasierte Analyse parameterabhängiger Strömungen

Bearbeitet von: Tino Weinkauff, Jan Sahner, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Bernd R. Noack, Bert Günter, Frank Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, TU Berlin; Holger Theisel, Technische Fakultät, Universität Magdeburg; Kuangyu Shi, Hans-Peter Seidel, Max-Planck-Institut für Informatik Saarbrücken; George Haller, Department of Mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, USA

Förderung: DFG-Sonderforschungsbereich 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“, Projekt A10

Im Sonderforschungsbereich 557 wird die Strömung u. a. um eine Hochauftriebskonfiguration durch periodisches Ein- und Ausblasen aktiv beeinflusst. Ziel ist es, den Auftrieb bei Start und Landung zu steigern, um Treibstoff zu sparen. Aus

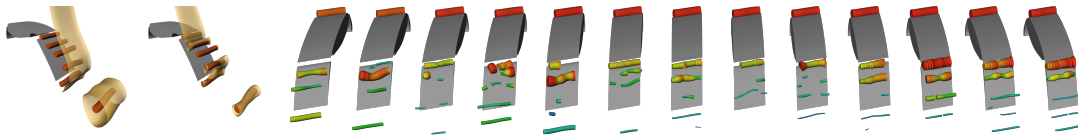


ABBILDUNG 2.29: Wirbelstrukturen werden als Extremallinien abgeleiteter Größen extrahiert, etwa als (rote) Linien minimalen Drucks, die Zentrallinien der (gelben) Druck-Isosflächen. Mittels dieses Verfahrens konnten 13 verschiedenen Flügelaktuationsintensitäten am SCCH-Modell automatisch bearbeitet werden.

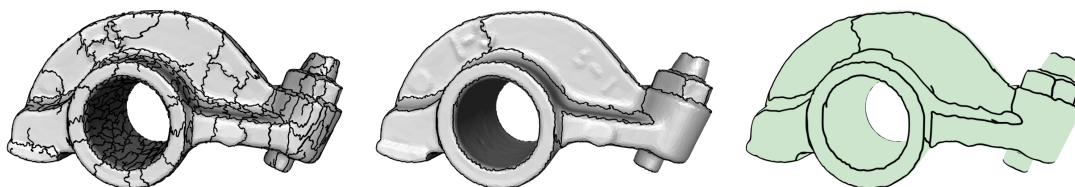


ABBILDUNG 2.30: Die ableitungsfreie Extraktion von Extremalstrukturen wurde in 2D entwickelt. Ausgehend von einem zu feinen Kandidatensatz von Linien im Morse-Smale-Komplex werden die optimalen Extremallinien extrahiert, die die Geometrie des Objekts bestimmen.

der Vielzahl von Parametern wie Anregeort, -frequenz und -intensität soll der Parametersatz ermittelt werden, der den Auftrieb maximiert. Da die simulierten Daten mit 200 GB zu groß sind, um sie mittels direkter Visualisierungsverfahren zu untersuchen, haben wir Verfahren entwickelt, diese Datensätze automatisch auf die für die jeweilige Fragestellung wesentlichen Merkmale, in diesem Fall Wirbelstrukturen, zu reduzieren. Dies gelingt, indem sie als Extremalstrukturen gewisser Strömungsgrößen aufgefaßt werden (siehe Abbildung 2.29). Im Jahr 2007 haben wir auf diese Weise umfangreiche Strömungsdaten aus dem SFB zur Frequenz- und Intensitätsaktuation am SCCH-Modell analysiert. Dies trug wesentlich zum Verständnis der Strömungsphysik der komplexen Tragflächenumströmung bei ([6], siehe Abbildung 2.29)

Ein Schritt zur weiteren Verbesserung von Laufzeit und Robustheit stellte die Entwicklung ableitungsfreier Verfahren zur Extraktion von Extremalstrukturen auf Basis der diskreten Morse-Smale-Theorie dar. Dies geschah zunächst in 2D [3] zur Detektion von Kanten auf Flächen, siehe Abbildung 2.30. Momentan befinden wir uns in der Umsetzung dieses Ansatzes auf 3D.

Anisotropes Glyphsampling zur Tensorfeldvisualisierung

Bearbeitet von: Ingrid Hotz

Kooperationspartner: Michael Schlemmer, Martin Hering-Bertram, Hans Hagen, TU Kaiserslautern; Christoph Garth, Bernd Hamann, Wolfgang Kollmann, IDAV at University of California, Davis, USA

Förderung: DFG-Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe Visualisierung

Ein wesentliches Ziel bei der Analyse von Vektorfeldern ist das Erkennen und Verfolgen von Strukturen über die Zeit. Dazu gehört die Spezifikation von Strukturen, sowie das Auffinden im Datensatz – unabhängig von Orientierung und Größe. Wir haben ein Verfahren entwickelt, das benutzerdefinierte Strukturen in 2D-Vektorfeldern durch invariante Momente charakterisiert und ähnliche Gebiete im Datensatz markiert, vgl. Abbildung 2.31 [4]. Der Ansatz ermöglicht einen Vergleich von Vektorfeldstrukturen und deren Verfolgung über die Zeit.

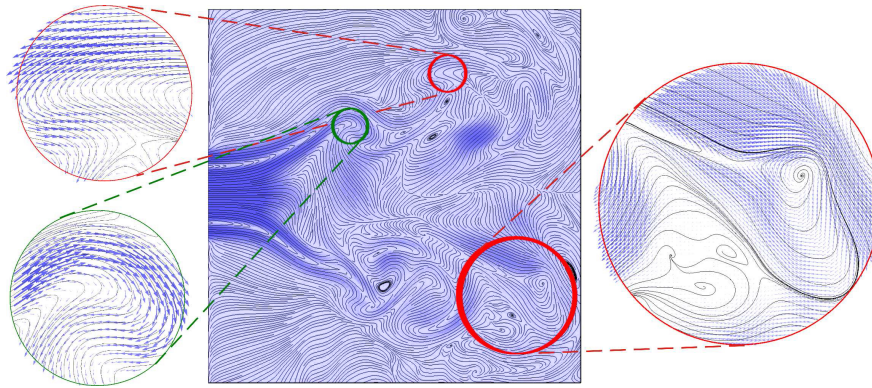


ABBILDUNG 2.31: Strömungsstrukturen, die ähnlich den vom Benutzer ausgewählte Strukturen (grün) sind, werden interaktiv angezeigt (rot).

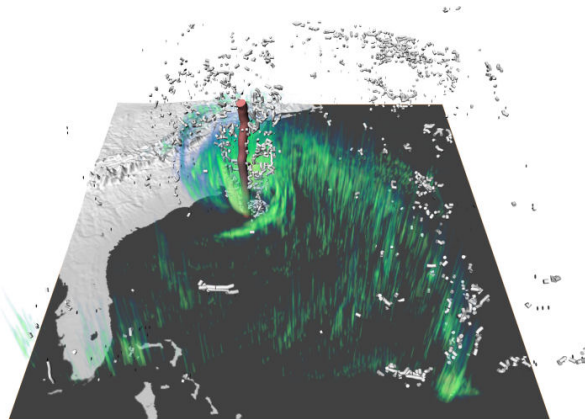
homogeneous flow	source / divergence	sink / convergence	counter-clockwise rotation	clockwise rotation	compressed rotation	saddle
$\Psi_1 = 0$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 = \frac{2}{3\sqrt{\pi}}$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 = -\frac{2}{3\sqrt{\pi}}$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 = i\frac{2}{3\sqrt{\pi}}$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 = -i\frac{2}{3\sqrt{\pi}}$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 \approx -i0.1677$ $\Psi_{2,3,4} = 0$	$\Psi_1 = 0$ $\Psi_{2,3,4} = 0$

ABBILDUNG 2.32: Invariante Momente für Basisstrukturen eines Vektorfeldes.

Invariante Momente haben eine lange Tradition in der Mustererkennung von Bildern. Momente sind dabei gewichtete Mittelwerte der Bildpixel. Sie basieren auf der Projektion der Bildfunktion auf einer polynomialen Basis. Durch eine Analyse des Transformationsverhaltens der Momente unter Rotation und Skalierung



(a) Strömungsvisualisierung mit Rauch



(b) von uns extrahierte Zentrallinie des Wirbels

ABBILDUNG 2.33: Experimentelle Wirbelvisualisierung mit Rauch, durchgeführt am NASA Langley Research Center (links). Unser Verfahren extrahiert die Zentrallinie des Wirbels in zeitabhängigen Strömungen, hier am beispielsweise am Datensatz des Hurrikans Isabel (rechts).

lassen sich Kombinationen von Momenten definieren, die invariant unter diesen Transformationen sind [1]. Wir haben diese Ideen auf zweidimensionale Vektorfelder übertragen. Eine einfache Beschreibung des Transformationsverhaltens erreichen wir durch die Einführung komplexer Momente basierend auf komplexen Vektorfeldern. Dies ermöglicht die Definition einer neuen Klasse von invarianten Vektormomenten.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Kernlinien von Partikelwirbeln (Tino Weinkauff, Jan Sahner, Hans-Christian Hege; Kooperation: Holger Theisel, Technische Fakultät, Universität Magdeburg)

Die Strömungsphysik hält keine allumfassende Definition eines Wirbels bereit. Eine für zeitunabhängige Strömungen in der Literatur häufig verwendete Charakterisierung zielt auf Wirbelkernlinien ab, d. h. Linienstrukturen, um die Strömungspartikel zirkulieren (Abbildung 2.33a zeigt den Wirbelnachlauf eines landenden Flugzeugs). Diesen Ansatz haben wir auf zeitabhängige Strömungen erweitert [7] und sind damit zum Beispiel in der Lage, Zentrallinien von Wirbelstürmen (siehe Abbildung 2.33b) oder etwa die Wirbelstraße einer Zylinderumströmung (Abbildung 2.34) zu extrahieren. Mit bestehenden Verfahren war dies für zeitabhängige Datensätze bisher nicht möglich.

Analyse zerebraler Aneurysmen (Christoph Petz, Olufemi Rosanwo, Hans-Christian Hege; Kooperation: Leonid Goubergrits, Klaus Affeld, Labor für Biofluidmechanik, Charité Berlin; Andreas Spuler, Helios-Klinikum Berlin; Förde-

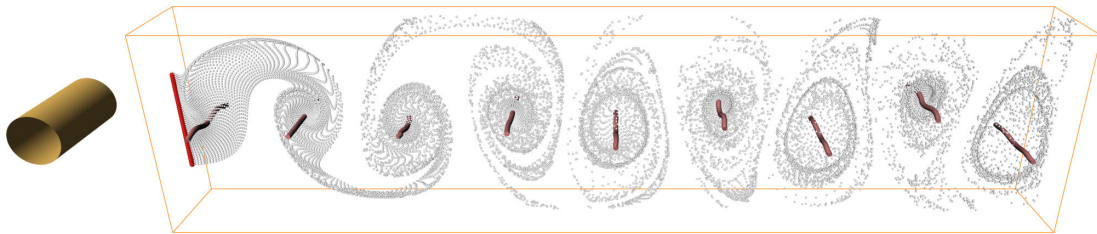


ABBILDUNG 2.34: Extrahierte Zentrallinien von Wirbeln im zeitabhängigen Zylindernachlauf; die extrahierten Strukturen sind von spiralförmigen Partikelbahnen umgeben.

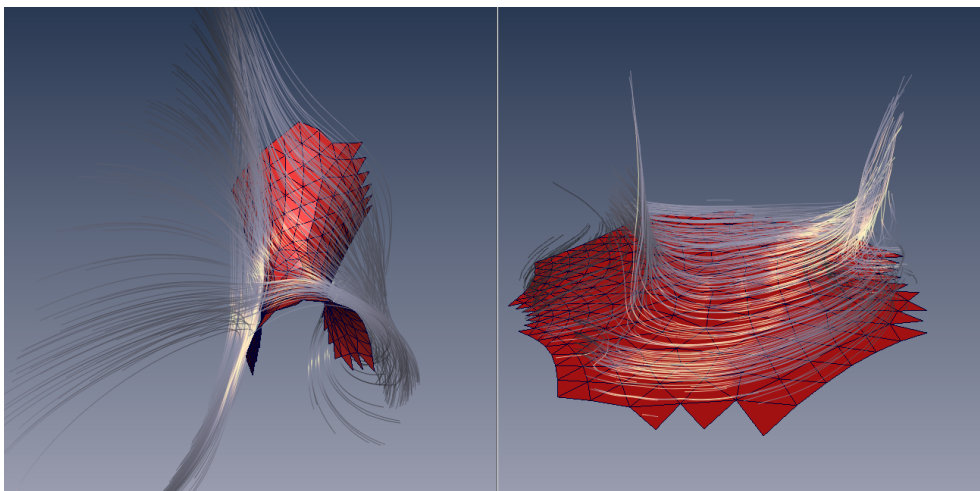


Abbildung 2.35: Stromliniendarstellung an der gekrümmten Oberfläche (links) und im flachen Parameterraum (rechts). Im flachen Parameterraum sind zwei Ablösebereiche deutlich zu erkennen, Stromlinienrichtungen parallel und tangential zur Wand sind besser erkennbar als in der Nähe der gekrümmten Oberfläche.

rung: DFG-Projekt „Patientenspezifische Analyse zerebraler Aneurysmen: Hämodynamik zerebraler Aneurysmen“)

Die Hämodynamik zerebraler Aneurysmen ist ein wichtiger Faktor für die Risikobewertung einer Ruptur. Strömungsgrößen können in der Bildgebung nicht aufgenommen werden, sie werden deshalb durch Strömungssimulation in individuellen Aneurysmamodellen berechnet. Die wandnahe Strömung ist dabei von besonderem Interesse. Im Berichtszeitraum wurde eine Methode entwickelt, bei der die gekrümmte Geometrie der Wand in eine flache Form überführt wird und die angrenzenden Strömungsfelder entsprechend transformiert werden ([2]). Die Strömungsvisualisierung wird dann in diesem transformierten Raum durchgeführt. Damit ist es möglich, wandnahe Strömungen verdeckungsfrei und in einem standardisierten Koordinatensystem zu analysieren (siehe Abbildung 2.35).

VIRTUE – VIRTual Tank Utility in Europe (Christoph Petz, Hans-Christian Hege; Kooperation: Dieke Hafermann, Heinrich Streckwall, Jochen Marzi (Hamburgische Schiffbau-Versuchsanstalt (HSVA); Christine de Jouët, Principia, La Ciotat, Frankreich; Stefan Harries, FRIENDSHIP-Systems GmbH, Potsdam; Förderung: Europäische Union, Projekt „VIRTUE“)

Für die Vorhersage der hydrodynamischen Eigenschaften eines neuen Schiffmodells werden traditionell maßstabsgetreu verkleinerte Schiffmodelle hergestellt und in großen Schlepptanks untersucht. In dem EU-Projekt VIRTUE wird ein virtuelles Schiffsbassin zur Simulation des Schiffsverhaltens entwickelt.

Der Vergleich von unterschiedlichen Lösungen eines gegebenen Strömungsproblems ist von großer Bedeutung: Lösungen unterscheiden sich z. B. durch Wahl des Lösungsverfahrens, des Turbulenzmodells oder des Berechnungsgitters. Im Berichtszeitraum wurde ein Vergleich mit mehreren Teilnehmern durchgeführt. Dabei haben die Teilnehmer die Strömung eines Schiffspropellers mit identischen Parametern berechnet, mit gleicher Geometrie, gleicher Drehzahl, aber mit unterschiedlichen Strömungslösern. Vergleichende Visualisierungen wurden am ZIB erstellt. Sie dienen als Grundlage zur Bewertung der Ergebnisse.

Die Visualisierungsmethoden wurden in eine Integrationsumgebung des VIRTUE-Projektes eingebettet und anhand zahlreicher Testfälle in den Arbeitsabläufen der Projektpartner getestet.

Priority Streamlines (Ingrid Hotz; Kooperation: Michael Schlemmer, Hans Hagen, TU Kaiserslautern; Bernd Hamann, IDAV, UC Davis, USA; Förderung: DFG-Emmy-Noether Nachwuchsgruppe Visualisierung)

Strömungsvisualisierung basierend auf Stromlinien wird schnell unübersichtlich, wobei wesentliche Information verloren geht. Durch geschicktes Platzieren der Stromlinien in Gebieten besonderen Interesses kann man dieses Problem mildern. Wir haben eine Methode entwickelt, in der die Dichte der Stromlinien durch eine skalare Funktion kontrolliert wird [5]. Diese Funktion kann sich aus einer Merkmalsanalyse ergeben, benutzerdefiniert oder auch durch zusätzliche Feldgrößen wie z. B. Temperatur, Druck gegeben sein.

Publikationen

- [1] M.-K. Hu, *Visual pattern recognition by moment invariants*, IRE Transactions on Information Theory **8** (1962), Nr. 2, 179–187.
- [2] C. Petz, S. Prohaska, L. Goubergrits, U. Kertzsch und H.-C. Hege, *Near-wall flow visualization in flattened surface neighborhoods*, Proc. SimVis 2008, February 2008, S. 93 – 105.
- [3] J. Sahner, B. Weber, H. Lamecker und S. Prohaska, *Extraction of feature lines on surface meshes based on discrete morse theory*, Proc. Eurographics/IEEE

VGTC Symposium on Visualization (EuroVis '08), May 2008, to appear.

- [4] M. Schlemmer, M. Heringer, F. Morr, I. Hotz, M. Hering-Bertram, C. Garth, W. Kollmann, B. Hamann und H. Hagen, *Moment invariants for the analysis of 2d flow fields.*, IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. **13** (2007), Nr. 6, 1743–1750.
- [5] M. Schlemmer, I. Hotz, B. Hamann, F. Morr und H. Hagen, *Priority streamlines: A context-based visualization of flow fields*, EuroVis, 2007, S. 227–234.
- [6] T. Weinkauff, J. Sahner, B. Günther, H. Theisel, H.-C. Hege und F. Thiele, *Feature-based analysis of a multi-parameter flow simulation*, Proc. SimVis 2008, February 2008, S. 237 – 251.
- [7] T. Weinkauff, J. Sahner, H. Theisel und H.-C. Hege, *Cores of swirling particle motion in unsteady flows*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (Proceedings Visualization 2007) **13** (2007), Nr. 6, 1759–1766.

2.2.7 Computergrafik

Dieser methodische Schwerpunkt beinhaltet Beiträge zum Gebiet der Computergrafik und deren Anwendung in der Visualisierung und Datenanalyse. Thematisch stehen Renderingverfahren zur interaktiven Bildgenerierung aus großen Eingabedaten, Geometrieerzeugung und Geometrieverarbeitung im Mittelpunkt. Unter anderem wurde ein GPU-basiertes Raycastingverfahren zur integrierten Darstellung von gitter- und punktbasierten Datensätzen und ein Verfahren zur Platzierung von Glyphen zur Tensorfeldvisualisierung entwickelt. Diese und weitere Beiträge sind auf den folgenden Seiten zusammengefasst.

Volume Rendering

Bearbeitet von: Ralf Kähler, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Luciano Rezolla, MPI für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut); Tom Abel, Kavli Institute for Astrophysics and Cosmology (KIPAC); Stanford University, Stanford, USA

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Ziel ist die integrierte Visualisierung von Daten, die auf diskreten Gittern und als unstrukturierte Punktwolken gegeben sind, da in der numerischen Analyse zunehmend gitterbasierte und gitterlose Verfahren verwendet werden. Ein Beispiel dafür sind astrophysikalische Hydrodynamiksimulationen, in denen interstellare Gasdichte-, und Temperaturverteilungen mit Hilfe von block-strukturierten Gittern diskretisiert werden, während Verfahren der Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) die Verteilungen der sogenannten Dunklen Materie durch Punktwolken modellieren.



ABBILDUNG 2.36: Kombiniertes Rendering von punkt-, und gitterbasierten Datensätzen: Die Punktdaten repräsentieren Galaxie-Cluster, während die blauen und roten Bereiche interstellare Dichte-, und Temperaturverteilungen darstellen. Blaue Regionen stammen von heißem, ionisiertem Wasserstoff, rote Bereiche von neutralem Wasserstoffgas.

Die Kombination herkömmlicher interaktiver Visualisierungsverfahren, die auf semitransparenten Farabbildungen basieren, erweist sich für diese Art von Daten als problematisch, da sie eine korrekte Sortierung entlang der jeweiligen Blickrichtung voraussetzen. Dies kann insbesondere für große Datenmengen leicht zu Laufzeitproblemen führen.

Es wurde daher in Kooperation mit dem KIPAC ein interaktives GPU (*Graphics Processing Unit*)-unterstütztes Raycastingverfahren für kombinierte gitter- und punktbasierte Datensätze entwickelt. Um ein Resampling der Punktdaten auf Hilfgitter zu vermeiden, werden diese hierbei in einer speziellen Octree-Datenstruktur gespeichert, die mit Hilfe von 3D-Texturen kodiert und auf die GPU geladen wird. Dadurch kann während der Strahlintegration sehr effizient auf die Punktdaten zugegriffen werden, was eine korrekte Reihenfolge der Blending-Operationen gewährleistet und somit qualitativ hochwertige Renderingresultate ermöglicht [4].

Anisotropes Glyphsampling zur Tensorfeldvisualisierung

Bearbeitet von: Ingrid Hotz

Kooperationspartner: Louis Feng, Bernd Hamann, Kenneth I. Joy, Institute for Data Analysis and Visualization at University of California, Davis, USA

Förderung: DFG-Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe Visualisierung

Ziel dieses Projekts war ein Verfahren zur automatischen Platzierung von Samples. Die spezifischen Anforderungen sind aus folgenden Anwendungen abgeleitet: Glyphen-basierte Visualisierung: Glyphen, die die lokalen Eigenschaften eines Feldes charakterisieren, werden häufig zur Darstellung komplexer Felder verwendet (z. B. Ellipsoide für Tensoren). Optimale Ausnutzung des Platzes erfordert eine

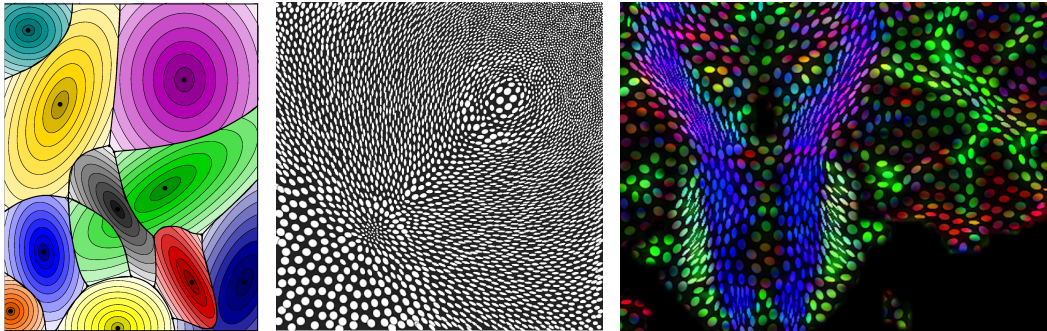


ABBILDUNG 2.37: Links: Anisotrope Voronoi-Tessellierung. Mitte und rechts: Gleichmäßig verteilte anisotrope Samples (Daten: Verspannungen in einem Materialblock, Diffusions-MRI des menschlichen Gehirns).

dichte Packung der Glyphen. Eine Platzierung auf Gittern wird diesem Anspruch nicht gerecht.

Textur-basierte Tensorfeld Visualisierung – Linien Integral Convolution (LIC) [3]: Stochastische Samples werden als Startpunkt für die Erzeugung einer Faserstruktur verwendet. Die Dichte und Größe der Samples bestimmt die Faserdicke und Dichte. Regelmäßige Strukturen in der Ausgangstextur oder Löcher führen zu sichtbaren Artefakten.

Es ergeben sich folgende Ziele: Effiziente Erzeugung stochastischer anisotroper Samples, deren Größe und Form durch eine Riemannsche Metrik (abgeleitet von Skalar-, Vektor- oder Tensorfeld) definiert ist. Die Samples sind weitestgehend überlappungsfrei und approximieren eine verallgemeinerte Poisson-Scheiben-Verteilung. Sie überdecken das Definitionsgebiet dicht, ohne regelmäßige Strukturen zu erzeugen. Um diese Ziele zu erreichen, haben wir ein Verfahren entwickelt, dessen Kernstück ein iterativer Relaxationsprozess ist, basierend auf einer anisotropen Voronoi-Zerlegung des Definitionsgebietes, siehe Abbildung 2.37. Unsere Arbeit baut dabei auf Ideen aus der Abtasttheorie und der Gittergenerierung auf. Zur Evaluierung unserer Ergebnisse verwenden wir Qualitätsmaße im Orts- und im Frequenzraum [2].

Landschaftsvisualisierung

Bearbeitet von: Malte Clasen, Liviu Coconu, Philip Paar, Hans-Christian Hege
Kooperationspartner: Wieland Röhricht, Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e. V., Müncheberg; Klaus Müller, Astrid Artner, Institut für Sozioökonomie am ZALF Müncheberg; Hans Pretzsch, Stefan Seifert, Lehrstuhl für Waldwachstumskunde, TU München; Oliver Deussen, Carsten Colditz, Institut für Computergrafik und



ABBILDUNG 2.38: Biosphere3D: Durch ein physikalisches Lichtstreuungsmodell können atmosphärische Effekte für jede Kameraposition in Echtzeit berechnet werden. Über eine Benutzeroberfläche kann die Darstellung der Szene beeinflusst werden, rechts z. B. das Gelände im Überblick.

Medieninformatik, Universität Konstanz

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU)

Der Schwerpunkt Landschaftsvisualisierung beschäftigt sich primär mit der interaktiven Darstellung von Vegetation und von GIS-Daten. Das Hauptanwendungsgebiet ist die Landschaftsplanung und die Landschaftsarchitektur. Probleme stellen die Erzeugung einer realistisch wirkenden Vegetation aus nur groben Beschreibungen (etwa: „Wald des Typs...“, ohne Informationen über die Positionen und Arten der einzelnen Bäume) sowie die morphologische Komplexität und Vielzahl der Pflanzen dar.

In dem seit August 2005 laufenden Forschungsverbundvorhaben SILVISIO wurde, aufbauend auf dem Vorgängerprojekt Lenné3D, das System Biosphere3D zur interaktiven 3D-Landschaftsvisualisierung entwickelt. Dessen Schwerpunkt liegt darin, Gelände und Vegetation beliebiger Größe möglichst realitätsnah darzustellen. Dazu wurde die Darstellung des Terrains um ein flexibles Framework zur Verarbeitung räumlicher Datensätze erweitert, [1]. Die Plausibilität der Computergrafik wurde durch ein physikalisches Lichtstreuungsmodell für atmosphärische Effekte verbessert (siehe Abbildung 2.38). Eine Benutzeroberfläche ermöglicht, alle Parameter der Szene und der Darstellung interaktiv zu verändern. Dadurch kann der Benutzer zwischen verschiedenen Planungsszenarien, Tageszeiten, Wetterlagen, Kamerapositionen und dergleichen ohne Wartezeit wechseln (siehe Abbildung 2.38). Das System wurde in [7] vorgestellt.

Geometriebasierter Formvergleich

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

Kooperationspartner: Martin Seebaß, Mercury Computer Systems Inc.; Peter Wust, Johanna Gellermann, Klinik für Strahlentherapie, Charité, Campus Benjamin Franklin; Thomas Lange, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Campus Berlin-Buch; Ernst-Johannes Haberl, AG Päd-

iatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Markus Heller, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Georg Duda, Georg Bergmann, Charité, Campus Mitte

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Die Identifikation korrespondierender Punkte auf verschiedenen, zueinander homöomorphen Formen stellt ein grundlegendes Problem bei der quantitativen dreidimensionalen Formanalyse dar, so z.B. bei der Erzeugung statistischer Formmodelle (s. S.59, 65, 66, 67 und 70).

In den meisten Anwendungsfällen sind jedoch nur wenige Merkmale eindeutig zuzuweisen, so dass größtenteils geeignet interpoliert werden muss. Wenn Formunterschiede nicht durch Verformungen bedingt sind, dann bieten sich dazu Distanzmaße an, die rein geometrische Ähnlichkeit zweier Flächen messen. Das Fundamentaltheorem der Flächentheorie besagt, dass sich geometrische Ähnlichkeit vollständig durch Metrik und extrinsische Krümmung charakterisieren lässt.

Da die Vermischung von Merkmals- und Interpolationsbewertung im Allgemeinen schwierig ist, liegt ein möglicher Zugang darin, Merkmale separat zu behandeln und als feste Randbedingungen in den Interpolationsprozess einfließen zu lassen. Häufig wird die extrinsische Krümmung (engl. bending) auch als ein solches Merkmal wahrgenommen. Somit bietet sich als ein sinnvolles Ähnlichkeitsmaß die metrische Verzerrung an (engl. Stretching).

Im Rahmen einer Doktorarbeit [5] wurde eine Methode entwickelt, dieses Ähnlichkeitsmaß robust auf diskret gegebenen Flächen zu berechnen. Dazu wird die Korrespondenzabbildung diskretisiert, und das Funktional nur auf dem 1-Skelett der Diskretisierung, das durch Geodäten aufgespannt wird, ausgewertet. Die Optimierung erfordert keine Berechnung einer globalen Parametrisierung der Flächen und ist somit für Flächen beliebiger Topologie geeignet.

Visualisierung von quantenmechanischen Systemen

Bearbeitet von: Michael Koppitz, Hans-Christian Hege

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F7

Die Visualisierung quantenmechanischer Vorgänge steckt noch in den Anfängen. Die hohe Dimensionalität der mathematischen Beschreibung stellt eine große Herausforderung dar.

Im Berichtszeitraum wurden mehrere Methoden zur Darstellung hochdimensionaler Daten implementiert und ihre Anwendbarkeit auf quantenmechanische Systeme untersucht. Die Verfahren lösen das Problem nicht, sind aber im Verein mit spezifischeren, auf die Quantenmechanik ausgerichteten Verfahren nützlich. Als spezifischeres Verfahren wurde eine neue Darstellungstechnik entwickelt, die auf der Projektion in eindimensionale Unterräume basiert (siehe Abbildung 2.39). Diese Darstellung wurde unter anderem zum Vergleich von Berechnungsverfahren

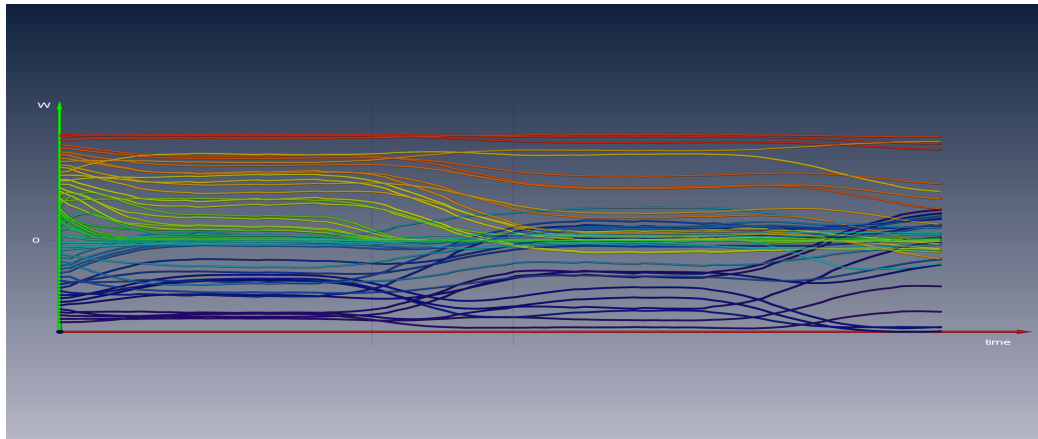


ABBILDUNG 2.39: Wignerfunktionswert entlang von Trajektorien aus numerischer Berechnung eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators mit quartischem Störpotential; der Farbwert entspricht dem initialen Wignerfunktionswert.

ren zur Dynamik in quantenmechanischen Systemen verwendet: der vollen numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung einerseits und einer Trajektorienbasierten Näherungsmethode andererseits. Solche Vergleiche sind relevant z. B. für chemische Modellrechnungen.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Punktbasierte Multiskalen-Visualisierung (Björn Meyer, Hans-Christian Hege)

Heutige bildgebende Verfahren sind in der Lage, Objekte auf einer großen Spanne von Längenskalen zu untersuchen. Die erzeugten Datensätze liegen zunächst als separate Elemente vor; es gilt diese miteinander zu verknüpfen und den Skalenübergang bei der Visualisierung zu überbrücken.

Im Berichtszeitraum wurde ein Konzept zur stufenlosen Visualisierung von Multiskalen-Daten entwickelt. Hierzu sollen die Daten zunächst in hierarchische Punktrepräsentationen überführt werden, die mittels Splatting effizient gerendert werden können. Um die Verbindung zwischen den Daten der verschiedenen Skalen herzustellen, werden größere Strukturen aus Instanzen kleinerer Objekte zusammengesetzt. Dabei kommen die Eigenschaften der Punktrepräsentation zum Tragen, die das Zusammenfügen mehrerer Objekte vereinfachen, da keine Konnektivitätsinformationen berücksichtigt werden müssen. Durch diesen geschachtelten Aufbau und die Vergrößerung der Punktwolken wird der stufenlose Übergang zwischen den Skalen erreicht. Die Konstruktion der größeren Strukturen durch vielfache Instanziierung einer Menge von Basiselementen ermöglicht den

speichereffizienten Aufbau von komplexen Szenen, deren Gesamtpunktmenge die Speicherkapazität übersteigen würde.

Optimierung der Qualität von Dreiecksnetzen (Michael Zilske, Hans Lamecker, Stefan Zachow)

In diesem Projekt wurde ein relaxierungsbasiertes isotropes Remeshing-Verfahren [10, 9, 8] um die Fähigkeit zur Verarbeitung nicht-mannigfaltiger Dreiecksgitter und zur Erhaltung von Merkmalslinien erweitert [12, 13]. Die Hauptidee der Erweiterung besteht darin, einen für Merkmalslinien etablierten Ansatz auch auf Nähte anzuwenden, um nicht-mannigfaltige Knoten entsprechend eingeschränkt in die Relaxierung einzubeziehen. Es wurde eine einfache Lösung für das Problem gefunden, die Samplingdichte dieser eingeschränkten Kantenzüge dynamisch auf ihre Umgebung abzustimmen, was wichtig für die Isotropie ist und in anderen Verfahren einen Vorverarbeitungsschritt erfordert. Das Verfahren kann in einem interaktiven Softwaresystem zum lokalen Remeshing nach Editierung des Gitters eingesetzt werden, zum Beispiel nach dem Einfügen von Schnittkurven. Es kann Eingaben mit beliebiger Topologie verarbeiten und hochgradig reguläre Gitter erzeugen, in denen die Merkmalslinien und Nähte nur sehr geringe Störungen der Dreiecksqualität verursachen (Abbildung 2.40).

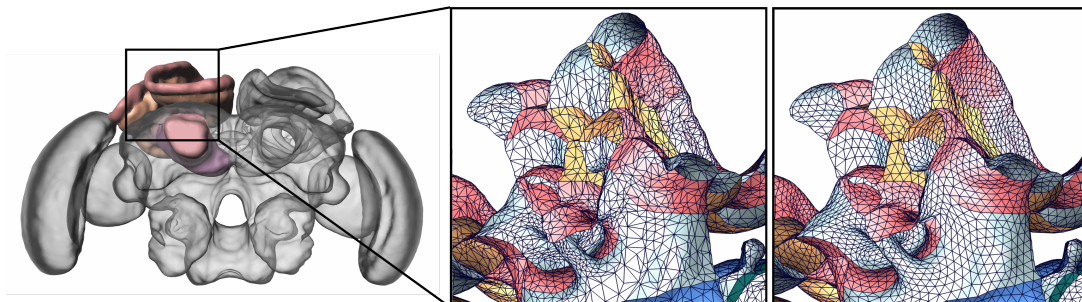


ABBILDUNG 2.40: Geometrische Optimierung der Vernetzung des aus konfokalen Mikroskopiedaten rekonstruierten Modells eines Bienengehirns mit einer Vielzahl von Kompartimenten und daraus resultierender nicht-mannigfaltiger Topologie an den Gebietsrändern.

Konsistente Gebietszerlegung von Flächen (Antonia Wittmers, Britta Weber, Hans Lamecker, Stefan Zachow)

Die konsistente Zerlegung zueinander homöomorpher Flächen spielt eine wichtige Rolle für die quantitative Formanalyse, zum Beispiel bei der Erstellung von statistischen Formmodellen oder als Initialisierung für variationelles Shape Matching (siehe 2.2.7). Für die Zerlegung wurde am ZIB ein Softwarewerkzeug zur interaktiven Manipulation von Kurven auf triangulierten Oberflächen weiterentwickelt, mit dem beispielsweise automatisch gefundene Merkmalskurven (siehe 2.2.6) nachbearbeitet werden können. Um die Konsistenz zweier unterschiedlich

eingebetteter Pfadnetze derselben Topologie zu gewährleisten und bei komplizierten Topologien zu beschleunigen, wurde ein Verfahren entwickelt, das den Benutzer bei der Übertragung der Pfade unterstützt, dabei die Konsistenz prüft und gegebenenfalls korrigiert.

Volumengittergenerierung (Bertram Wölk, Kai Pöthkow, Michael Zilske, Stefan Zachow)

Im Rahmen der Geometrieverarbeitung zur Erstellung individueller FE-tauglicher Patientenmodelle [11] wurde eine Software zur Erzeugung hybrider semistrukturierter Volumengitter entwickelt. Diese Gitter bestehen aus Tetraederelementen mit sehr homogener Qualität im Innern und anisotropen Dreiecksprismenschichten mit ausgeprägter Orthogonalität im Wandbereich. Gitter dieser Art werden für Strömungssimulationen in komplexen räumlichen Gebieten benötigt, wie z. B. der Simulation der Luftströmung in den oberen Atemwegen (siehe Abschnitt 2.2.3) oder der Simulation von Blutfluss in Gefäßbäumen und Aneurysmen (Abbildung 2.41, Abschnitt 2.2.6) [6]. Zur Analyse des Einflusses von Geometrieänderungen auf die Strömung und für die Behandlung von Fluid-Strukturkopplung wurde ein schnelles Gitterdeformationsverfahren auf Basis einer vereinfachten physikalischen Modellierung implementiert. Damit lassen sich Gitter interaktiv oder auch datengesteuert unter Wahrung der inneren Konnektivität und einer guten Elementqualität in ihrer Anordnung modifizieren (Abbildung 2.41, rechts).

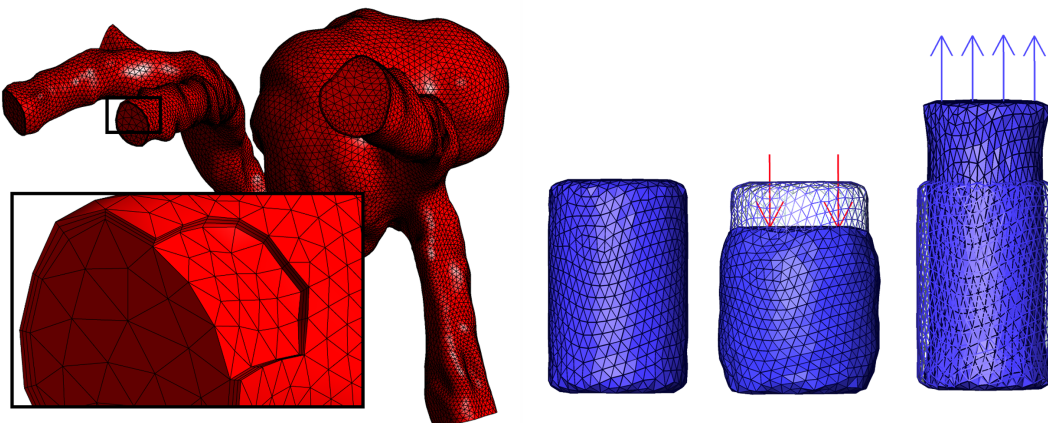


ABBILDUNG 2.41: Links: Geometrisches Modell eines Aneurysmas (Tetraedergitter mit Wandprismen), rechts: Gitterdeformation

Publikationen

- [1] M. Clasen und H.-C. Hege, *Clipmap-based terrain data synthesis*, Proc. SimVis 2007 (T. Schulze, B. Preim und H. Schumann, Hg.), SCS Publishing House e.V., 2007, S. 385–398.

-
- [2] L. Feng, I. Hotz, B. Hamann und K. I. Joy, *Anisotropic noise samples*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics **14** (2008), Nr. 2, 342–354.
 - [3] I. Hotz, L. Feng, H. Hagen, B. Hamann, B. Jeremic und K. I. Joy, *Physically based methods for tensor field visualization*, VIS '04: Proceedings of IEEE Visualization 2004, IEEE Computer Society Press, oct 2004, S. 123–130.
 - [4] R. Kaehler, T. Abel und H.-C. Hege, *Simultaneous gpu-assisted raycasting of unstructured point sets and volumetric grid data*, Proceedings of IEEE/EG International Symposium on Volume Graphics 2007, A K Peters, 2007, S. 49–56.
 - [5] H. Lamecker, *Variational and Statistical Shape Modeling for 3D Geometry Reconstruction*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 2008, in preparation.
 - [6] M. Neugebauer, G. Janiga, Özlem Krischek, S. Zachow und B. Preim, *Generierung qualitativ hochwertiger Modelle für die Simulation von Blutfluss in zerebralen Aneurysmen*, Simulation and Visualization 2008 (Hauser et al., Hg.), SCS Publishing House e.V., 2008, S. 221–235.
 - [7] P. Paar und M. Clasen, *Earth, landscape, biotope, plant. interactive visualisation with biosphere3d*, Proceedings of CORP - 12th International Conference on Urban Planning and Spatial Development in the Information Society, May 20th - 23rd (2007), 207–214.
 - [8] V. Surazhsky und C. Gotsman, *High quality compatible triangulations*, Proceedings of 11th International Meshing Roundtable, 2002, S. 183–192.
 - [9] V. Surazhsky, P. Alliez und C. Gotsman, *Isotropic remeshing of surfaces: a local parameterization approach*, Proceedings of 12th International Meshing Roundtable, 2003.
 - [10] V. Surazhsky und C. Gotsman, *Explicit surface remeshing*, SGP '03: Proceedings of the 2003 Eurographics/ACM SIGGRAPH symposium on Geometry processing, Eurographics Association, 2003, S. 20–30.
 - [11] S. Zachow, M. Zilske und H.-C. Hege, *3d reconstruction of individual anatomy from medical image data: Segmentation and geometry processing*, 25. ANSYS Conference & CADFEM Users' Meeting, 2007, Proc. CD 2.12.15.
 - [12] M. Zilske, *Adaptives Remeshing von Nicht-Mannigfaltigen Dreiecksnetzen*, Diplomarbeit, Free University Berlin, 2007.
 - [13] M. Zilske, H. Lamecker und S. Zachow, *Adaptive remeshing of non-manifold surfaces*, Computer Graphics Forum **27** (2008), Nr. 2, to appear.

2.2.8 Ganzzahlige Optimierung

Die ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei denen bestmögliche diskrete Entscheidungen getroffen werden müssen. Zum Beispiel kann eine Maschine zu einem bestimmten Zeitpunkt entweder angeschaltet werden oder nicht, eine Firma kann fünf oder sechs, aber keine 5,2 Arbeiter einsetzen, eine Buslinie kommt in einem bestimmten Takt, z. B. alle 10, 15 oder 20 Minuten. Viele solche Probleme aus Bereichen wie Telekommunikation, Verkehr und Logistik lassen sich als sogenannte *gemischt-ganzzahlige Programme* (Mixed integer programs, MIPs) formulieren. Zunehmender Konkurrenz- und Rationalisierungsdruck verstärken das Interesse der Industrie an der Optimierung solcher Entscheidungen und Prozesse. Das Ziel dieses Schwerpunktes ist, MIPs und die damit modellierten Probleme so weit wie möglich mittels eines allgemeinen, von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus lösen zu können. Die Breite der Anwendungen stellt dabei hohe Anforderungen an die Lösungsalgorithmen. Das Hauptaugenmerk des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* liegt auf der Erforschung von Methoden, welche die grundlegenden Lösungsalgorithmen weiter verbessern.

Die Projekte des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* ordnen sich in diesen Rahmen wie folgt ein: Das Projekt *Lineare, ganzzahlige und Constraint-Programmierung* verbessert die Algorithmen zur allgemeinen Lösung von MIPs und verwandten Problemen – insbesondere den Löser SCIP. *Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung* behandelt die besonderen Schwierigkeiten, die bei der Lösung hochgradig symmetrischer ganzzahliger Optimierungsprobleme auftreten. Das Projekt *Exakte ganzzahlige Programmierung* versucht die Anfälligkeit von gängigen MIP-Lösern gegenüber Rundungsfehlern aufgrund von Fließkommaarithmetik zu beseitigen, ohne die Lösungsgeschwindigkeit zu sehr zu verlangsamen. Die *Kooperationen mit Siemens* ermöglichen die Rückkopplung mit Anwendern in der Industrie, während die *Kooperation mit ILOG* bei der Weiterentwicklung und Pflege von SCIP hilft. *Unzulässige lineare Ungleichungssysteme* treten in interessanten Anwendungen auf und erfordern spezielle Algorithmen, z. B. zum Auffinden maximaler zulässiger Teilsysteme.

Als Neuerung wurde im September 2007 die erste Version der ZIB Optimization Suite sowie die Version 1.0 von SCIP der Öffentlichkeit unter <http://zibopt.zib.de> zur Verfügung gestellt, siehe auch Abschnitt 6.3. Dieses für akademische Zwecke freie Softwarepaket umfasst die folgenden Teile, die selbstverständlich auch weiterhin einzeln verfügbar sind:

- Die *Modellierungssprache Zimpl* [12] beschleunigt die Übersetzung mathematischer Modelle in gängige Eingabeformate für MIP-Löser.
- Der *LP-Löser SoPlex* [23] dient zum Lösen von linearen Programmen (LPs), die unter anderem bei der Lösung von gemischt-ganzzahligen Programmen als Unterprobleme auftreten.

- Das *CIP-Framework* SCIP dient zum Lösen von gemischt-ganzzahligen Programmen und „Constraint Integer Programs“ (CIPs) und kann als Branch-cut-and-price-Framework eingesetzt werden. Zimpl-Modelle können direkt in SCIP eingelesen werden.

Erhältlich ist weiterhin der *Basisverifizierer* perPlex, der die Bestimmung von exakten Optimallösungen von linearen Programmen erlaubt, siehe auch das Projekt *Exakte ganzzahlige Programmierung* und Abschnitt 6.3.

Durch die Einführung der ZIB Optimization Suite und die Veröffentlichung von Version 1.0 von SCIP hat sich das Interesse an dieser Software deutlich vergrößert. Die ZIB Optimization Suite wurde in den letzten vier Monaten des Jahres 2007 über 250-mal heruntergeladen. Hinzu kommen noch circa 1.200 Downloads von SoPlex und SCIP im Laufe des Berichtszeitraumes.

Am 11. und 12. Oktober 2007 haben wir einen SCIP-Workshop am ZIB durchgeführt haben. Über 40 Teilnehmer aus ganz Deutschland wurden in die Arbeitsweise von SCIP eingeführt und haben die Benutzung durch Programmieraufgaben eingeübt. Weil weiterhin Bedarf besteht, planen wir auch 2008 einen Workshop anzubieten.

Lineare, ganzzahlige und Constraint-Programmierung

Bearbeitet von: Timo Berthold, Marc Pfetsch, Kati Wolter

Kooperationspartner: Alexander Martin, Technische Universität Darmstadt; Christoph Helmberg, Technische Universität Chemnitz

Eine Vielzahl von Problemen der kombinatorischen Optimierung und des Operations Research lassen sich als *gemischt-ganzzahlige Programme* formulieren. Zwei bekannte Techniken zur Lösung von MIPs sind Schnittebenenverfahren und Branch-and-bound. Diese beiden Methoden lassen sich zum *Branch-and-cut*-Verfahren kombinieren, auf welchem nahezu alle gängigen MIP-Löser basieren.

Zugleich werden Branch-and-bound-Techniken auch zur Lösung von *Constraint-Programmen* (CP) eingesetzt, die eine Oberklasse der MIPs darstellen und sich durch eine allgemeinere Modellierungsmethodik auszeichnen.

Das Ziel der in der Abteilung Optimierung entwickelten Software SCIP [1, 2, 4] ist, die effektiven MIP-Löseverfahren mit den Modellierungsfreiheiten des CP-Ansatzes zu kombinieren. SCIP ermöglicht zwei Anwendungsarten: Zum einen kann es als Branch-and-cut-and-price-Framework zur Entwicklung problemspezifischer Codes eingesetzt werden. Zum anderen ist es durch die bereits integrierten Standard-Plugins der derzeit schnellste nichtkommerzielle MIP-Löser. Abbildung 2.42 vergleicht das geometrische Mittel der Laufzeiten von neun verschiedenen MIP-Lösern auf 68 Testinstanzen; nicht gelöste Instanzen gehen hierbei mit dem Zeitlimit von zwei Stunden ein.

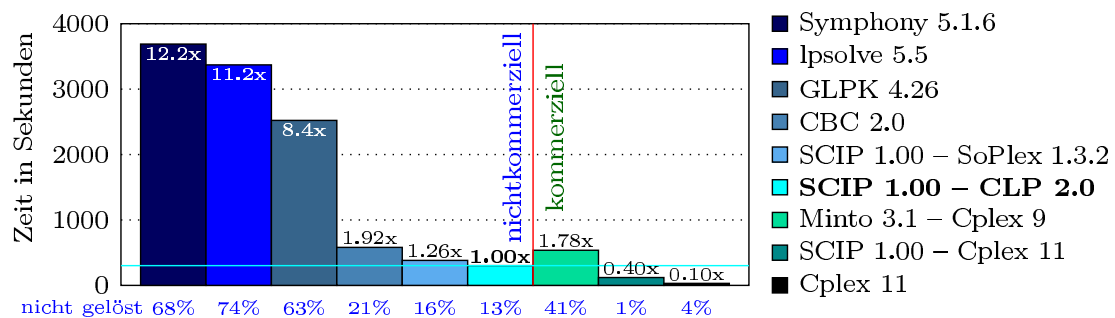


ABBILDUNG 2.42: Mittlere Laufzeit verschiedener kommerzieller und nicht-kommerzieller MIP-Löser. Die zugrunde liegenden Daten stammen von der Webseite von Hans Mittelmann [16].

Die Dissertation von Tobias Achterberg zur Integration von ganzzahliger Programmierung und Constraint-Programmierung [1] bietet eine umfassende Übersicht über sämtliche in SCIP vorhandene Funktionen. Die umfangreichen Tests, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, führten zu einer erheblichen Steigerung der Performance sowie der Stabilität der Software.

Die nun standardmäßig verwendete Konfliktanalyse [3], der neu eingebaute Flussüberdeckungs-Separierer und die Verbesserung existierender Schnittebenen [22] leisten ebenfalls einen wichtigen Beitrag zur Performancesteigerung. Außerdem wurde die Funktionalität von SCIP durch eine Grundversion der Constraint-Handler für SOS1- und SOS2-Bedingungen, Schreibmethoden für gängige Dateiformate und eine Auswahl von vordefinierten Parametersettings erweitert. Die Dokumentation von SCIP wurde ebenfalls deutlich ausgebaut und durch Beispiele ergänzt. Dadurch konnte eine höhere Benutzerfreundlichkeit erreicht werden.

Die Diplomarbeit von Manuel Kutschka [14] untersucht die Klasse der $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnitte und verdeutlicht, dass das Separieren derartiger Schnitte die Anzahl der zur Lösung benötigten Branch-and-bound-Knoten merklich reduziert. Die im Jahr 2006 verfasste Diplomarbeit von Timo Berthold zu Primalheuristiken für gemischt-ganzzahlige Programme [6, 7] wurde im Berichtsjahr mit Preisen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) und der Gesellschaft für Operations Research (GOR) ausgezeichnet.

Im Berichtsjahr wurde SCIP als Branch-and-cut-Framework in insgesamt 15 institutsinternen und verschiedenen externen Projekten verwendet, in vier Diplomarbeiten genutzt und an drei Universitäten zur Lehre eingesetzt.

Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung

Bearbeitet von: Timo Berthold, Martin Grötschel, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Volker Kaibel, Andreas Loos, Matthias Peinhardt; Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B12

Obwohl Symmetrien in vielen Teilen der Mathematik als positive Eigenschaft angesehen werden, können sie in ganzzahligen linearen Programmen zu einer erheblichen Einschränkung der praktischen Lösbarkeit führen. Die Arbeit von gängigen IP-Lösern wird auf zweierlei Weise beeinträchtigt. Zum einen wird der Suchraum unnötig groß: Es ist z. B. für Branch-and-bound-Algorithmen zunächst nicht zu erkennen, ob ein Teil des Suchraums redundant ist, weil ein strukturell identischer, d. h. symmetrischer Teil bereits zuvor untersucht wurde. Zum anderen sind die dualen Schranken, die man aus der LP-Relaxierung solcher symmetrischer Modelle berechnen kann, in vielen Fällen sehr schwach. In zahlreichen Projekten am ZIB und im MATHEON tauchten in den vergangenen Jahren IP-Modelle auf, die solche Symmetrien aufweisen.

Am ZIB wurde ein polyedrisches Verfahren entwickelt, mit dem Symmetrien in sogenannten Zuordnungsstrukturen behandelt werden können [11]. Hierzu betrachtet man 0/1-Matrizen mit genau einer 1 in jeder Zeile. Symmetrien entsprechen dabei Permutationen der Matrixspalten, die Symmetriegruppe ist also eine Untergruppe der vollen symmetrischen Gruppe der Größe der Spaltenanzahl. Man untersucht nun die konvexe Hülle solcher 0/1-Matrizen, die lexikographisch maximal bezüglich der zeilenweisen Ordnung sind. Diese speziellen Polytope heißen *Orbitope*.

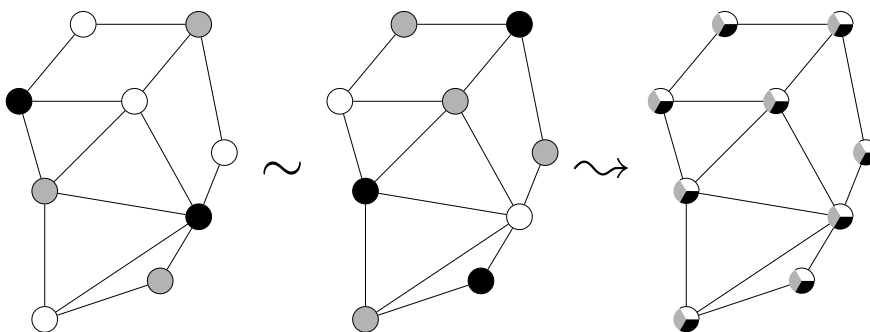


ABBILDUNG 2.43: Beispiel Knotenfärbung: Zueinander symmetrische Lösungen führen zu wertlosen Relaxierungen.

Ein klassisches Beispiel, das eine solche Zuordnungsstruktur enthält, ist das Knotenfärbungsproblem, bei dem in einem gegebenen Graphen die Knoten mit möglichst wenig Farben so gefärbt werden sollen, dass adjazente Knoten unterschiedliche Farben erhalten. Eine natürliche Modellierung dieses Problems ver-

wendet Binärvariablen, die für jede Kombination eines Knotens v und einer Farbe c anzeigen, ob v mit c gefärbt wird. Eine Symmetrie entspricht dabei einer Permutation der Farbklassen. Dadurch erhält man bei n verwendeten Farben aus jeder Lösung $n! - 1$ äquivalente Lösungen (einen *Orbit* von Lösungen), welche die gleiche Struktur und insbesondere die gleiche Anzahl von Farben haben. Abbildung 2.43 zeigt ein Beispiel.

Um diese Symmetrie vollständig zu brechen, wird ein eindeutiger Repräsentant aus jedem Orbit ausgewählt, in diesem Fall die in Bezug auf die Spalten lexikographisch maximale Matrix. Für Orbitope konnten wir eine vollständige lineare Beschreibung durch eine exponentielle Anzahl von Ungleichungen finden [11]. Diese Beschreibung lässt sich in linearer Zeit separieren. Unser Resultat zeigt in gewissem Sinn, wie man die Lösungsmenge bestmöglich durch Hinzufügen von weiteren Ungleichungen auf ein solches Repräsentantensystem verkleinern kann. Man kann sie dann z. B. zu obiger Formulierung des Knotenfärbungsproblems hinzufügen.

Eine etwas andere, erfolgreich zur Lösung von Graphenpartitionierungsproblemen eingesetzte Methode ist das orbitopale Fixieren [10]. Hierbei haben wir einen Linearzeit-Algorithmus entwickelt, der für einen Knoten und eine zugehörige Fixierung von Variablen im Branch-and-bound-Baum entscheidet, ob weitere Variablen durch die zugrunde liegende Orbitop-Struktur fixiert werden können, oder ob der Knoten sogar unzulässig ist. Der Einsatz dieses Verfahrens beschleunigt die Lösung von Graphenpartitionierungsproblemen deutlich – auch im Vergleich zu existierenden Symmetriebrechungsmöglichkeiten in dem kommerziellen IP-Löser CPLEX. Im Berichtszeitraum wurde ein Constraint zur Brechung orbitopaler Symmetrien mittels Separierung oder Fixierungen in das Branch-and-cut-Framework SCIP integriert.

Tim Januschowski hat in seiner Diplomarbeit [8] das Zusammenspiel von Symmetriehandlung durch Orbitope und problemspezifischen Strukturen für das Maximale- k -färbbare-Untergraphen-Problem untersucht. Dabei stellt sich heraus, dass die Kombination beider Teile komplexe polyedrische Auswirkungen hat. Die Facetten des zugehörigen Polytops sind wesentlich schwieriger zu handhaben, sowohl was die theoretischen Untersuchungen angeht, als auch in der praktischen Umsetzung in einem Branch-and-cut-Algorithmus.

Ein weiterer wichtiger Punkt ist die Erkennung von Symmetrien in beliebigen ganzzahligen linearen Programmen. Es zeigt sich, dass das Erkennen von orbitopalen Symmetrien sich je nach Voraussetzung auf Graphen- oder Subgraphenisomorphieprobleme reduziert. Während das letztere schwer (NP -vollständig) ist, ist der Komplexitätsstatus von Graphenisomorphie unbekannt. Es existiert aber Software, die das Graphenisomorphieproblem für viele Instanzen in akzeptabler Zeit löst. Ein Aufsatz zur Symmetrierkennung ist in Arbeit.

Exakte ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Thorsten Koch, Marc Pfetsch, Kati Wolter

Kooperationspartner: Ernst Althaus, Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken; Christoph Buchheim, Universität zu Köln

Förderung: DFG-Schwerpunktprogramm 1307 „Algorithm Engineering“

Durch die Fortschritte bei Lösern für *gemischt-ganzzahlige Programme* sind diese heute weithin akzeptiert als leistungsfähiges Instrument zur Behandlung von Optimierungsproblemen aus vielfältigen Industrieanwendungen. Allerdings basieren Teile gängiger MIP-Löser auf *Fließkommaarithmetik*, wodurch Rundungsfehler bei arithmetischen Operationen auftreten können, z. B. im zugrundeliegenden Löser für lineare Optimierungsprobleme. Dies kann dazu führen, dass die berechneten Lösungen nicht optimal oder sogar unzulässig sind. Ferner ist es möglich, dass Lösungen gefunden werden, obwohl keine existieren und umgekehrt, dass von zulässigen Instanzen behauptet wird, sie wären unzulässig.

In den meisten praktischen Anwendungen wird diese Fehleranfälligkeit jedoch ignoriert – in vielen Fällen genügen die produzierten Lösungen den jeweiligen Genauigkeitsanforderungen. Die Lage ändert sich jedoch fundamental, wenn reine Zulässigkeitsprobleme betrachtet werden, wenn falsche Antworten zu rechtlichen Folgen führen können oder wenn MIPs verwendet werden, um theoretische Fragen zu untersuchen. Eine wesentliche Anwendung ist die *Chipverifikation*, siehe dazu auch den separaten Abschnitt 2.2.13 zur Verifikation. Weitere Beispiele solcher Anwendungen sind die Vertragsvergabe mittels *kombinatorischer Auktionen* und die *Designtheorie*.

Wir entwickeln und implementieren in diesem im Juni 2007 angelaufenen DFG-Projekt Ansätze zur exakten Lösung von MIPs. Unsere Resultate integrieren wir in SCIP (siehe Abschnitt 6.3). Der Löser soll sowohl für zulässige als auch für unzulässige Instanzen eine korrekte Antwort geben, d. h. eine exakte Optimallösung oder ein exaktes Unzulässigkeitszertifikat.

Im Berichtszeitraum haben wir einen *Branch-and-bound-Ansatz* verfolgt. Hier besteht das Hauptproblem darin, sichere duale Schranken mit Hilfe der LP-Relaxierung zu produzieren. Wir haben die Idee aus [17] umgesetzt, in der man mit dem unsicheren Ergebnis eines auf Fließkommaarithmetik basierenden LP-Lösers startet und Dualitätsargumente und Intervallararithmetik verwendet, um sichere Schranken zu berechnen. Dieses Verfahren soll auf MIPs mit unbeschränkten Variablen erweitert werden. Eine Alternative besteht darin, einen existierenden exakten LP-Löser zu verwenden. Wir planen die beiden Varianten miteinander zu vergleichen.

Für den ersten Ansatz haben wir bereits einen Prototypen zur exakten Lösung ganzzahliger Programme mit beschränkten Variablen implementiert. Eine der beiden Methoden soll später zu einem exakten *Branch-and-cut-Verfahren* ausgebaut werden. Das beinhaltet die Entwicklung exakter Preprocessing-Techniken,

sicherer Primalheuristiken und von Algorithmen zur sicheren Generierung von Schnittebenen. Außerdem wollen wir Zertifikate für unzulässige MIPs im Zusammenhang mit exakten MIP-Lösern untersuchen.

Siemens-Kooperation

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Thorsten Gellermann, Alexander Martin, Technische Universität Darmstadt

Förderung: Siemens AG, Corporate Technology, Software & Engineering

Die Kooperation zwischen Siemens, dem ZIB und der TU Darmstadt dient der Weiterentwicklung von linearer und ganzzahliger Optimierungssoftware, insbesondere von SCIP und SoPlex unter besonderer Berücksichtigung von Anforderungen, die bei Siemens entstehen.

Das Projekt ist durch die folgenden Beobachtungen motiviert. Einerseits werden die in der Praxis auftretenden linearen und linear ganzzahligen Optimierungsprobleme, auch aufgrund der Weiterentwicklung der Rechnertechnik, immer größer. Zum anderen werden immer neue Bereiche in die Optimierung einbezogen, was zu neuen Anforderungen an die Löser führt. Hier ist besonders der Umgang mit beliebigen zusätzlichen, auch nicht-linearen, kombinatorischen Nebenbedingungen zu nennen.

Ein Augenmerk der Untersuchungen dieser Kooperation soll auf der Lösung extrem großer linearer und numerisch schwieriger Programme liegen. Ein weiterer Aspekt, der untersucht werden soll, ist die Lösung strukturell schwieriger linear ganzzahliger Programme, in denen unter Umständen auch nicht-lineare kombinatorische Nebenbedingungen vorkommen. Erste Schritte hierzu wurden bereits im Bereich Nichtlineare Optimierung (siehe Abschnitt 2.2.10) und an der TU Darmstadt unternommen. Am Ende der beschriebenen Entwicklung soll ein robuster, innovativer Löser stehen, der die zukünftig auftretenden Probleme löst.

ILOG-Kooperation

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Tobias Achterberg, ILOG

Förderung: ILOG

Die Kooperation zwischen ILOG und dem ZIB dient der gemeinsamen Forschung und Entwicklung im Bereich gemischt-ganzzahliger Programmierung (Mixed integer programming, MIP).

Im Berichtszeitraum wurde an der Separierung von $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen und Mehrgüterfluss-Schnittebenen sowie der Enumeration von Lösungen binärer Programme gearbeitet.

In ihrer Basis-Version ergeben sich $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen durch Aggregation der Nebenbedingungen in einer MIP-Instanz mit Gewichten 0 und $\frac{1}{2}$ und nachfolgender Anwendung von "Complemented mixed integer rounding" [15]. Die entscheidende Fragestellung ist, welche Nebenbedingungen man in die Aggregation aufnimmt, um eine verletzte Schnittebene zu erhalten. Hierfür wurden die von ZIB-Mitarbeitern entwickelten Ideen [13, 14] umgesetzt und erweitert. Das resultierende Verfahren wurde bereits erfolgreich innerhalb von CPLEX 11 implementiert und ist auch in SCIP verfügbar.

Netzwerk-Flüsse spielen in vielen Anwendungsgebieten der diskreten Optimierung eine große Rolle. Innerhalb des ZIB tauchen Netzwerk-Modelle insbesondere in der Verkehrsplanung sowie in der Optimierung von Telekommunikationsnetzwerken auf. Ein interessanter Spezialfall sind dabei die sogenannten kapazitätsbeschränkten Mehrgüterfluss-Netzwerke. Sie bilden den zentralen Kern in Modellen zur Dimensionierung von Telekommunikationsnetzen. Im Rahmen der Kooperation mit ILOG wurde an der automatischen Erkennung solcher Netzwerkstrukturen innerhalb von gemischt-ganzzahligen Programmen gearbeitet. Unter Ausnutzung der erkannten Struktur sollen dann Schnittebenen aus der Netzwerkdimensionierung separiert werden, um die Effizienz von allgemeinen MIP-Lösern wie SCIP und CPLEX auf solchen Instanzen zu steigern. Auch hierbei kommen am ZIB entwickelte Verfahren zum Einsatz [20, 21].

Binäre Programme sind MIPs bei denen alle Variablen nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Für kleine binäre Programme (z. B. mit $n \leq 16$ Variablen) ist es oft wesentlich effizienter, die 2^n möglichen Kombinationen für Belegungen der Variablen durchzuprobieren als einen komplexeren Algorithmus zu verwenden. Unter gezielter Ausnutzung der Hardware, insbesondere des Prozessor-Caches, kann man eine oder auch alle Optimallösungen solcher Instanzen in Bruchteilen von Sekunden enumerieren. Im Rahmen der Kooperation mit ILOG wurde gemeinsamer Code zur Enumeration der Lösungen solcher kleinen binären Programme entwickelt. Die Zielsetzung war es, diese Verfahren als Unterfunktion zum Lösen deutlich größerer MIP-Instanzen zu verwenden. Zum Beispiel lässt sich die Enumeration kleiner Teilprobleme innerhalb des Preprocessings und der Schnittebenen-Generierung einsetzen. Außerdem kann man damit Subprobleme innerhalb des Branch-and-bound-Baumes behandeln, wenn diese durch Fixierungen von Variablen auf eine geringe Größe reduziert wurden.

Unzulässige lineare Ungleichungssysteme

Bearbeitet von: Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Sadegh Jokar, Volker Mehrmann, Harry Yserentant, Technische Universität Berlin

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D18

Dieses Projekt untersucht die Struktur von unzulässigen linearen Ungleichungssystemen $Ax \leq b$, wo A eine reelle $m \times n$ Matrix ist und b ein m -dimensionaler Vektor. Die Lösung x darf dabei beliebige reelle Werte annehmen.

In der Vergangenheit wurde das in diesem Zusammenhang grundlegende NP-schwere *Maximum Feasible Subsystem Problem* (MaxFS) untersucht. Hier soll für ein gegebenes unzulässiges System $Ax \leq b$ ein zulässiges Teilsystem maximaler Kardinalität gefunden werden.

Basierend auf den Arbeiten [5, 18] wurde ein Branch-and-cut-Algorithmus für MaxFS entwickelt, der im Berichtszeitraum nochmals verbessert werden konnte, siehe [19]. Die Implementierung basiert auf dem am ZIB entwickelten Branch-and-cut-Framework SCIP, siehe Abschnitt 6.3. Zur Zeit versuchen wir diese Methoden auf zweierlei Weise zu erweitern:

Zum einen können die für MaxFS entwickelten gültigen Ungleichungen auch für sogenannte Fixed-Charge Probleme verwendet werden. Die grundlegende Struktur dieser Probleme besteht in der Verknüpfung einer binären Variable y und einer nichtnegativen kontinuierlichen Variable x durch $x \leq M \cdot y$, wobei M eine genügend große Zahl ist. Dies bedeutet, dass $y = 1$ sein muss, wenn $x > 0$ ist. Man hat so über y Zugriff auf die Nicht-Null-Einträge in der Variablen x ; siehe auch die Diskussion unten.

Zum anderen versuchen wir, auch den Fall von MaxFS, in dem die Lösung x nur ganzzahlige Werte annehmen kann, behandeln zu können. Diese Untersuchungen sind im Zusammenhang mit der Entwicklung von Techniken für unzulässige ganzzahlige Optimierungsprobleme von Bedeutung, siehe die Projekte *Exakte ganzzahlige Programmierung* und *Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen* in Abschnitt 2.2.13.

Ein mit MaxFS eng verwandtes Problem besteht darin, eine Lösung eines überbestimmten linearen Gleichungssystems mit möglichst wenigen Nicht-Null-Einträgen zu finden. Dieses Problem wurde in der letzten Zeit intensiv im Bereich der Signal- und Bildverarbeitung betrachtet. Hier entspricht die rechte Seite des Gleichungssystems dem Signal bzw. Bild, welches mit Hilfe verschiedener Basen (z. B. Fourier- und Waveletbasen) dargestellt werden kann. Erlaubt man die Auswahl von Vektoren aus unterschiedlichen Basen (erzeugt also ein überbestimmtes System), so kann die Anzahl der benötigten Nicht-Null-Einträge oft drastisch reduziert werden, was z. B. zur effizienteren Verarbeitung der Daten führen kann. Wenn darüber hinaus kleine Abweichungen in der Darstellung erlaubt sind, können weitere Effizienzsteigerungen (in Abwägung mit dem resultierenden Fehler) erreicht werden.

Im Zusammenhang mit dem von 11/2006 bis 04/2008 laufenden MATHEON-Projekt „Sparse representation of solutions of differential equations“ (D18) haben wir den Branch-and-cut-Algorithmus für MaxFS verwendet, um Lösungen mit möglichst wenig Nicht-Null-Einträgen für ein überbestimmtes lineares Glei-

chungssystem zu finden. Wir können damit für kleine Beispiele Optimallösungen berechnen und darüberhinaus die Eindeutigkeit der Optimallösungen untersuchen – eine in der Literatur häufig untersuchte Fragestellung [9]. Weiterhin haben wir sechs verschiedene Heuristiken für dieses Problem untersucht, siehe [9]. Es zeigt sich, dass aus unterschiedlichen Bereichen stammende Methoden sehr gute Lösungen für dieses Problem erzeugen können. Insbesondere verbessern sie das in der Signalverarbeitung üblicherweise verwendete Basis Pursuit.

Der Hauptschwerpunkt des MATHEON-Projektes liegt jedoch auf dem Versuch, die eben dargestellten Methoden zur effizienteren Lösung von partiellen Differentialgleichungen zu verwenden. Hierbei soll die Triangulierung bzw. Basisdarstellung in einem Finite-Elemente-Verfahren durch ein generisches – statt durch ein geometrisch motiviertes – Verfahren gesteuert werden. Unsere Experimente zeigen, dass durch die Berechnung von Lösungen mit wenigen Nicht-Null-Elementen die Anzahl der benötigten Basisfunktionen reduziert werden kann. Zur Zeit untersuchen wir, ob diese Effizienzgewinne die längere Laufzeit rechtfertigen. Außerdem versuchen wir, eine theoretische Erklärung für die von uns beobachteten Ergebnisse zu finden. Ein Artikel hierzu ist in Arbeit.

Verbesserung der linearen Algebra in Simplex-basierten LP- und MIP-Lösern

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Jörg Liesen, Robert Luce, Reinhard Nabben, Technische Universität Berlin; Olaf Schenk, Universität Basel, Schweiz

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B17

Der Simplexalgorithmus gehört zu den am häufigsten verwendeten Algorithmen der Optimierung. Insbesondere zur Lösung von gemischt-ganzzahligen Programmen ist er eine unverzichtbare Subroutine.

Ein Kernaspekt des Simplexalgorithmus ist die Faktorisierung und Lösung eines linearen Gleichungssystems. Hierbei kommt eine LU-Faktorisierung mit dynamischer Markowitz-Pivotisierung zum Einsatz wie sie schon seit den 50er Jahren bekannt ist.

Ziel des Projektes war es, festzustellen, ob die Nutzung moderner Methoden der numerischen linearen Algebra, insbesondere von iterativen Verfahren, hier eine Verbesserung ermöglicht. Dazu war die Auswahl eines Testsets von realen LP- und IP-Problemen eine wesentliche Voraussetzung, um eine sinnvolle Aussage über den Nutzen anderer Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems treffen zu können.

Wie sich herausstellte, ist das Markowitz-basierte Verfahren bei typischen Gleichungssystemen wie sie bei LPs und IPs auftreten, kaum zu schlagen, da es in natürlicher Weise in der Lage ist, die strukturellen Eigenschaften der Gleichungssysteme (sehr dünn besetzt und unstrukturiert) auszunutzen. Große der Teile der

Gleichungssysteme lassen sich durch geeignete Permutation schnell auf Diagonalgestalt bringen. Der Rest kann dann effizient mit geringem Fill-in faktorisiert werden. Hier gelingt es neueren Verfahren nicht, eine vorteilhaftere Pivotreihenfolge zu finden.

Publikationen

- [1] T. Achterberg, *Constraint Integer Programming*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2007.
- [2] T. Achterberg, *SCIP – a framework to integrate constraint and mixed integer programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [3] T. Achterberg, *Conflict analysis in mixed integer programming*, *Discrete Optimization* **4** (2007), Nr. 1, 4–20.
- [4] T. Achterberg, T. Berthold, M. Pfetsch und K. Wolter, *SCIP (Solving Constraint Integer Programs), Dokumentation*, <http://scip.zib.de>.
- [5] E. Amaldi, M. E. Pfetsch und L. E. Trotter, Jr., *On the maximum feasible subsystem problem, IISs, and IIS-hypergraphs*, *Mathematical Programming* **95** (2003), Nr. 3, 533–554.
- [6] T. Berthold, *Primal Heuristics for Mixed Integer Programs*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2006.
- [7] T. Berthold, *Heuristics of the branch-cut-and-price-framework SCIP*, Report 07-30, ZIB, 2007, erscheint im Tagungsband zur Operations Research 2007.
- [8] T. Januschowski, *Symmetry breaking for the maximal k -colourable subgraph problem*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2007.
- [9] S. Jokar und M. E. Pfetsch, *Exact and approximate sparse solutions of underdetermined linear equations*, Report 07-05, ZIB, 2007.
- [10] V. Kaibel, M. Peinhardt und M. E. Pfetsch, *Orbitopal fixing*, Proceedings of the 12th Integer Programming and Combinatorial Optimization conference (IPCO) (M. Fischetti und D. Williamson, Hg.), LNCS, Bd. 4513, Springer-Verlag, 2007, S. 74–88.
- [11] V. Kaibel und M. E. Pfetsch, *Packing and partitioning orbitopes*, Report 06–17, ZIB, 2006, erscheint in *Mathematical Programming*.
- [12] T. Koch, *Rapid mathematical programming*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2004.

- [13] A. M. C. A. Koster, M. Kutschka und A. Zymolka, *Algorithms to separate $\{0, \frac{1}{2}\}$ Chvátal-Gomory cuts*, Tagungsband, 15th Annual European Symposium on Algorithms, ESA 2007, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 4698, Springer-Verlag, 2007, S. 693–704.
- [14] M. Kutschka, *Algorithmen zur Separierung von $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnitten*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2007.
- [15] H. Marchand und L. A. Wolsey, *Aggregation and mixed integer rounding to solve MIPs*, Operations Research **49** (2001), Nr. 3, 363–371.
- [16] H. Mittelmann, *Decision tree for optimization software: Benchmarks for optimization software*, Februar 2008, <http://plato.asu.edu/bench.html>.
- [17] A. Neumaier und O. Shcherbina, *Safe bounds in linear and mixed-integer linear programming*, Mathematical Programming **99** (2004), Nr. 2, 283–296.
- [18] M. E. Pfetsch, *The maximum feasible subsystem problem and vertex-facet incidence of polyhedra*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2002.
- [19] M. E. Pfetsch, *Branch-and-cut for the maximum feasible subsystem problem*, SIAM Journal Optimization **19** (2008), Nr. 1, 21–38.
- [20] C. Raack, A. M. C. A. Koster, S. Orlowski und R. Wessäly, *Capacitated network design using general flow-cutset inequalities*, Tagungsband, International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, 2007.
- [21] C. Raack, A. M. C. A. Koster und R. Wessäly, *On the strength of cut-based inequalities for capacitated network design polyhedra*, Report 07-08, ZIB, 2007.
- [22] K. Wolter, *Implementation of Cutting Plane Separators for Mixed Integer Programs*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2006.
- [23] R. Wunderling, *Paralleler und objektorientierter Simplex-Algorithmus*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 1996.

2.2.9 Diskrete Strukturen

Vielen kombinatorischen Optimierungsaufgaben liegen diskrete Strukturen zugrunde, deren Verständnis theoretische Einsichten und die Entwicklung effizienter Lösungsmethoden überhaupt erst ermöglicht. In unseren Anwendungen treten vor allem vielfältige Arten von Graphen auf, in den Lösungsverfahren damit zusammenhängende Polyeder. Diese Strukturen werden in diesem Schwerpunkt untersucht.

Aufgrund der Wegberufungen von Volker Kaibel, Arie Koster und Brigitte Lutz-Westphal sind die Projekte *Geometrie und Kombinatorik von 0/1-Polytopen*, *Diskrete Mathematik für die Schule* und *Baumweite und kombinatorische Optimierung* in der letzten Berichtsperiode ausgelaufen; das Projekt *Stabile Mengen und perfekte Graphen* ist zum 31. März 2007 ausgelaufen.

Das verbliebene Projekt *Längenbeschränkte Keise und Wege* wurde in das allgemeinere Projekt *Kardinalitätsbeschränkte kombinatorische Optimierung* überführt, in dem wir die polyedrische Struktur von kardinalitätsbeschränkten Optimierungsproblemen untersuchen. Beispielsweise ist es uns mittels Martin Grötschels sog. *Cardinality forcing inequalities* gelungen, eine vollständige lineare Beschreibung des *kardinalitätsbeschränkten Matroid-Polytops* zu liefern.

Des weiteren befindet sich ein neues Projekt *Dynamische Programmierung versus ganzzahlige Programmierung* im Aufbau. Einige kombinatorische Optimierungsprobleme lassen sich mittels dynamischer Programmierung effizient lösen. Uns interessiert dabei die Frage, wie man diese „Effizienz“ in Schnittebenen verwandeln kann, wenn man das gleiche oder ein ähnliches Problem mit einem Branch-and-cut-Ansatz lösen möchte. Erste Ergebnisse zielen in die Richtung, dass wir nun einige facettendefinierende Ungleichungen von zugehörigen Polyedern besser verstehen.

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Arie Koster

Kooperationspartner: Annegret Wagler, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Förderung: DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*

Nach zwei dreijährigen Phasen lief die DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“ am 31. März 2007 aus. In den ersten drei Jahren standen Konzepte zur Erweiterung der Klasse der Perfekten Graphen im Mittelpunkt unserer Arbeiten. In der zweiten Periode wurde neben der Entwicklung weiterer Konzepte wie dem *Imperfection Ratio* [6, 7] auch die kombinatorische Struktur der zugrundeliegenden ganzzahligen linearen Programme untersucht. Die Erforschung dieser 0-1-Probleme hat zu Resultaten geführt, die bei der Lösung allgemeiner ganzzahliger linearer Programme mit binären Variablen hilfreich eingesetzt werden können. Ein Beispiel dafür stellen stabile Mengen in Graphen dar. Eine stabile Menge ist eine Menge paarweise nicht benachbarter Knoten des Graphen. Wenn Bedingungen zwischen binären Variablen in ganzzahligen linearen Programmen „Stabilität“ in einem „Konfliktgraphen“ erfordern, können gültige Ungleichungen für das Stabile-Mengen-Polytop ebenfalls für solche allgemeinen Probleme gewinnbringend eingesetzt werden. So werden beispielsweise sog. Cliques-Ungleichungen bereits seit Jahren von (kommerziellen) IP-Lösern wie CPLEX standardmäßig erkannt und – sofern geeignet – eingesetzt.

Sobald die binären Variablen jedoch durch ganzzahlige Größen ersetzt werden, haben die Löser Schwierigkeiten, ähnliche Strukturen zu erkennen und auszunutzen. Eine Untersuchung der polyedrisch-kombinatorischen Struktur des zugehörigen Stabile-Multimengen-Polytops [8, 9] motivierte eine weiterführende Studie zu sogenannten $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen für allgemeine ganzzahlige Programme. Caprara und Fischetti [3] führen die $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen als spezielle Chvátal-Gomory-Schnittebenen ein. Sie können als eine Oberklasse der Kreis-Ungleichungen des Stabile-Mengen-Polytops betrachtet werden.

Die Separierung der am stärksten verletzten $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebene ist \mathcal{NP} -schwer und kann selbst als ganzzahliges lineares Programm formuliert werden. Eine Rechenstudie auf den Instanzen der MIPLIB [2, 1], siehe auch Abschnitt 6.3, konnte ein Verbesserungspotential der $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen zur Reduktion der Anzahl an Branch-and-Bound-Knoten aufzeigen, allerdings wurde durch die erforderlichen exakten Separierungen der Lösungsprozess insgesamt zunächst verlangsamt [5].

Durch den Einsatz verbesserter Preprocessing-Methoden konnte dieser nachteilige Laufzeiteffekt teilweise kompensiert und die Performance erheblich gesteigert werden. Ferner hat eine Analyse der einzelnen Separierungen ergeben, dass viele der gefundenen Ungleichungen nur einen marginalen Fortschritt bewirken. Anhand einer ausführlichen Rechenstudie konnte ein guter Kompromiss zwischen Separierungsdauer und -effektivität gefunden werden [5, 10]. Die Ergebnisse haben dazu geführt, dass die Separierung von $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen in der neuesten Version des kommerziellen IP-Lösers CPLEX aufgenommen wurden, siehe auch das Projekt ILOG-Kooperation in Abschnitt 2.2.8.

Kardinalitätsbeschränkte kombinatorische Optimierung

Bearbeitet von: Rüdiger Stephan

Kooperationspartner: Volker Kaibel, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Aus einem kombinatorischen Optimierungsproblem erhält man ein kardinalitätsbeschränktes kombinatorisches Optimierungsproblem, indem man nur solche zulässigen Lösungen erlaubt, deren Kardinalitäten Elemente einer vorher festgelegten Menge von natürlichen Zahlen sind. Das Traveling Salesman Problem oder das Problem, in einem Graphen einen ungeraden Kreis kleinsten Gewichts zu finden, sind beispielsweise solche Probleme. Beide Probleme sind natürlich für sich selbst betrachtet kombinatorische Optimierungsprobleme, aber im Lichte des Problems, in einem Graphen einen minimalen Kreis zu finden, sind die beiden genannten Probleme kardinalitätsbeschränkte Versionen des Letzteren.

In diesem Projekt stehen Probleme, bei denen mehr als eine Kardinalität zugelassen ist (also wie beim Ungeraden-Kreis-Problem), im Vordergrund. Untersucht wird vor allem die Facettialstruktur der zugehörigen Polyeder. Sei $\Pi = (E, \mathcal{I}, w)$ ein kombinatorisches Optimierungsproblem, wobei E die Grundmenge, $\mathcal{I} \subseteq 2^E$

die Menge der zulässigen Lösungen, und w die Zielfunktion ist, die zu maximieren ist. Ferner sei $c = (c_1, \dots, c_m)$, mit $0 \leq c_1 < \dots < c_m \leq |E|$ eine Kardinalitäts-Sequenz. Hat man nun eine ganzzahlige Beschreibung für Π , so erhält man eine für das kardinalitätsbeschränkte kombinatorische Optimierungsproblem $\Pi_c = (E, \mathcal{I}, w, c)$, definiert durch $\max w(I)$, $I \in \mathcal{I}$, $|I| = c_p$ für ein $p \in \{1, \dots, m\}$, indem man Grötschels *cardinality forcing inequalities* [4]

$$(c_{p+1} - |F|)x(F) - (|F| - c_p)x(E \setminus F) \leq c_p(c_{p+1} - |F|) \quad (2.1)$$

für alle $F \subseteq E$ mit $c_p < |F| < c_{p+1}$ für ein p

und die Schranken $x(E) \geq c_1$ sowie $x(E) \leq c_m$ dem gegenwärtigen IP hinzufügt. Allerdings definieren die cardinality forcing inequalities in dieser Form im Allgemeinen keine Facetten des zugehörigen Polytops $P_{\mathcal{I}}^c(E) := \text{conv}\{\chi^I : I \in \mathcal{I}, |I| = c_p \text{ für ein } p\}$. Ersetzt man in den Ungleichungen (2.1) die Zahl $|F|$ durch $r(F) := \max\{|I \cap F| : I \in \mathcal{I}\}$, so ergeben sich wesentliche stärkere Ungleichungen. Cardinality forcing inequalities dieser Form definieren z. B. Facetten für kardinalitätsbeschränkte Kreis-, Wege- oder Matchingpolytope [11]. Wenn (E, \mathcal{I}) ein Matroid ist, dann handelt es sich bei r um die übliche Rangfunktion, und man kann zeigen, dass die so modifizierten Cardinality forcing inequalities zusammen mit den Rangungleichungen, den Nichtnegativitätsbedingungen $x_e \geq 0, e \in E$, und der Bedingung $c_1 \leq x(E) \leq c_m$ eine vollständige Beschreibung des kardinalitätsbeschränkten Matroidpolytops liefern [12]. Ferner kann man in diesem Fall das Separierungsproblem für die modifizierten cardinality forcing inequalities auf das für die Rangungleichungen zurückführen.

Dynamische Programmierung versus Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Rüdiger Stephan

Im Rahmen dieses Projekts wird untersucht, inwiefern man aus der Dynamischen Programmierung Nutzen für die Ganzzahlige Programmierung ziehen kann. Beispielsweise lässt sich das Kürzeste-Wege-Problem mit dem Bellman-Ford Algorithmus effizient lösen. Der Algorithmus arbeitet natürlich auch dann noch korrekt, wenn man einen kürzesten Weg mit höchstens k Kanten sucht (das ist ja gerade die Substruktur, die der Algorithmus ausnutzt). Im Mittelpunkt der Untersuchungen steht nun die Frage, wie man diese „Effizienz“ des Bellman-Ford Algorithmus in Schnittebenen verwandeln kann bzw. ob man sie polyedrisch sichtbar machen kann. Im Berichtszeitraum haben wir uns dabei auf die Klasse der azyklischen Digraphen beschränkt.

Sei $D = (V, A)$ ein azyklischer Digraph, $s, t \in V$ zwei Knoten und $k \leq |V| - 1$ eine natürliche Zahl. Das $(s, t) - k$ -Wege-Polytop P_{st}^k ist die konvexe Hülle der Inzidenzvektoren aller einfachen (s, t) -Wege mit höchstens k Kanten. Da D azyklisch ist, hat P_{st}^k die schöne Eigenschaft, über seine Dominante $\text{dmt}(P_{st}^k) :=$

$P_{st}^k + \mathbb{R}_+^A$ charakterisiert werden zu können:

$$P_{st}^k = \{x \in \text{dmt}(P_{st}^k) : x \text{ erfüllt die Flusserhaltungsbedingungen}\}.$$

Unter den facettendefinierenden Ungleichungen für $\text{dmt}(P_{st}^k)$ befinden sich zwar einige, die bekannt sind, wie z. B. die (s, t) -Schnittungleichungen, aber die meisten Ungleichungen, darunter auch viele 0-1-Ungleichungen, blieben uns unverständlich. An dieser Stelle kommt nun die Dynamische Programmierung ins Spiel. Die ihr inhärente azyklische Struktur kann dazu verwendet werden, das $(s, t) - k$ -Wege-Problem auf ein einfaches (s, t) -Wege-Problem (d.h. ohne Kardinalitätsbeschränkung) zurückzuführen – wiederum auf einem azyklischen Digraphen, sagen wir $D' = (V', E')$. Da nun ein nicht-kardinalitätsbeschränktes (s, t) -Wege-Problem vorliegt, ist die Dominante des zugehörigen (s, t) -Wege-Polytops vollständig durch die Nichtnegativitätsbedingungen $x_e \geq 0, e \in E'$ und die (s, t) -Schnittungleichungen $x(C) \geq 1$ für alle (s, t) -Schnitte von D' bestimmt. Ein Teilerfolg zum Verständnis von $\text{dmt}(P_{st}^k)$ konnte nun dadurch erzielt werden, dass wir genau diejenigen (s, t) -Schnitte von D' identifizieren können, deren zugehörige Ungleichungen zu facettendefinierenden 0-1-Ungleichungen für $\text{dmt}(P_{st}^k)$ korrespondieren. Damit sind zumindest alle 0-1-Ungleichungen für $\text{dmt}(P_{st}^k)$ charakterisiert.

Wissenschaftliche Aufsätze zu diesem Themenkomplex sind in Arbeit.

Publikationen

- [1] T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *MIPLIB 2003*, <http://miplib.zib.de>, 2003.
- [2] R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal und M. W. P. Savelsbergh, *MIPLIB 3.0*, <http://www.caam.rice.edu/~bixby/miplib/miplib.html>.
- [3] A. Caprara und M. Fischetti, $\{0, \frac{1}{2}\}$ -*Chvátal-Gomory cuts*, *Math. Prog.* **74** (1996), 221–235.
- [4] M. Grötschel, *Cardinality homogeneous set systems, cycles in matroids, and associated polytopes*, *The Sharpest Cut – The Impact of Manfred Padberg and His Work* (M. Grötschel, Hg.), SIAM, Philadelphia, 2004, S. 199–216.
- [5] A. M. C. A. Koster, M. Kutschka und A. Zymolka, *Algorithms to separate $\{0, \frac{1}{2}\}$ Chvátal-Gomory cuts*, *Proceedings of the 15th Annual European Symposium on Algorithms (ESA 2007)*, LNCS, Bd. 4698, Springer, 2007, S. 693–704.
- [6] A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *The extreme points of $QSTAB(G)$ and its implications*, Report 06-30, ZIB, 2006.

- [7] A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *Comparing imperfection ratio and imperfection index for graph classes*, RAIRO – Operations Research (2008), erscheint demnächst.
- [8] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Stable Multi-Sets*, Math. Meth. Oper. Res. **56** (2002), Nr. 1, 45–65.
- [9] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *On cycles and the stable multi-set polytope*, Discrete Optim. **2** (2005), Nr. 3, 241–255.
- [10] M. Kutschka, *Algorithmen zur Separierung von $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnitten*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, August 2007.
- [11] R. Stephan, *Cardinality constrained combinatorial optimization: complexity and polyhedra*, unveröffentlicht.
- [12] R. Stephan, *On the cardinality constrained matroid polytope*, Report 08–08, ZIB, 2008.

2.2.10 Nichtlineare Optimierung und Steuerung

In den letzten 15 Jahren haben die Verfahren zur Lösung von linearen gemischt-ganzzahligen Programmen und zur Lösung von Optimalsteuerungsproblemen große Fortschritte gemacht. Entsprechend ist die Anzahl der Probleme, die mit diesen Methoden angegangen und gelöst werden, stark gestiegen. Wie nicht anders zu erwarten, gibt es aber viele Anwendungen, die Aspekte enthalten, die mit den derzeit verfügbaren Werkzeugen nicht oder nur schwer bearbeitet werden können.

Das Ziel dieses Schwerpunktes ist einerseits, Fortschritte bei der Entwicklung allgemeiner, problemunabhängiger Lösungsmethoden zu machen, um den Anwendern leistungsfähige Solver für Probleme mit nichtlinearen Komponenten zur Verfügung zu stellen. Erfahrungen und Inspiration wollen wir durch das Studium konkreter Anwendungen gewinnen. Die auf diese Weise erhaltenen Ergebnisse wollen wir anschließend prototypisch verallgemeinern.

Wir sehen im Überschneidungsbereich zwischen diskreter Optimierung, nichtlinearer Optimierung und optimaler Steuerung erhebliches Potential und erwarten dort beträchtliche Aktivitäten in den nächsten Jahren.

Modellierung nicht-linearer Nebenbedingungen in SCIP

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Lingfeng Niu, ICMSEC, Peking, China

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D17

Im Projekt *Produktionsplanung im Bergbau* (siehe Abschnitt 2.2.11) müssen nicht-lineare ganzzahlige Optimierungsprobleme gelöst werden, in denen insbesondere sogenannte Mixing-Constraints

$$a_1 b_2 = a_2 b_1$$

auftreten, wobei $a_1, a_2, b_1, b_2 \geq 0$.

Wir haben in diesem Projekt zunächst versucht, das resultierende Modell mit den gängigen, auf dem NEOS Server verfügbaren Programmen zu lösen. Dabei hat sich gezeigt, dass die derzeit verfügbaren nicht-linearen Löser kaum geeignet sind, Probleme mit Ganzzahligkeitsbedingungen zu lösen. Da viele Probleme sich im wesentlichen als MIPs modellieren lassen und nur an einzelnen Stellen nicht-lineare Zusammenhänge aufweisen, bietet sich folgender Ansatz an:

Basierend auf unserem sehr erfolgreichen Framework zur Lösung von Constraint Integer Programs SCIP (siehe Abschnitt 2.2.8) modellieren wir die nicht-linearen Nebenbedingungen als spezielle Constraints. Dazu wurden entsprechende Constraint-Handler in SCIP prototypisch implementiert. Die Modellierungssprache Zimpl (siehe Abschnitt 6.3) wurde erweitert, um solche nicht-linearen Nebenbedingungen zu unterstützen und der bekannte Solver IPOpt wurde zur Lösung der resultierenden NLPs mit SCIP verlinkt.

Es hat sich gezeigt, dass dies ein gangbarer Weg mit vielversprechenden Ergebnissen ist, aber noch erhebliche softwaretechnische Arbeiten notwendig sind, um ein stabiles Verfahren zu erhalten. In einem Workshop mit interessierten Teilnehmern von ZIB, TU Berlin und HU Berlin wurde beschlossen, baldmöglichst ein Projekt zur Umsetzung zu initiieren.

Optimalsteuerung von Abwassernetzen (SewerNetOpt)

Bearbeitet von: Martin Grötschel

Kooperationspartner: Marc Steinbach, Leibniz-Universität Hannover; Jens Burgschweiger, Berliner Wasserbetriebe; Kai Schröder, KompetenzZentrum Wasser Berlin

Förderung: KompetenzZentrum Wasser Berlin; Berliner Wasserbetriebe; Veolia Wasser GmbH, Berlin

In Siedlungsgebieten fallen häusliches und gewerbliches Schmutzwasser sowie (abhängig vom Versiegelungsgrad) erhebliche Mengen an Niederschlagswasser an. Zur besseren Ausnutzung der Kapazität vorhandener Entwässerungseinrichtungen wurde in den letzten 10 Jahren die Entwicklung der integrierten Steuerung von Kanalnetz und Kläranlage vorangetrieben, bisher aber für große, komplexe Systeme kaum in der Praxis realisiert. Aus diesem Grund wird in Berlin das Forschungsprojekt EVA durchgeführt, das die Umsetzung eines Entscheidungshilfesystems zur Verbundsteuerung von Abwasserpumpwerken zum Ziel hat. SewerNetOpt ist ein Teilprojekt des Verbundprojekts EVA.

Ziel des Teilprojekts ist die Erstellung eines dynamischen Optimierungsmodells des gesamten Berliner Entwässerungssystems zur Steuerung der Abwasserströme mit dem Ziel, während extremer Niederschlagsereignisse den Austritt von Wasser aus dem Kanalsystem zu verhindern bzw. den austretenden Schmutzwasseranteil zu minimieren. Durch zeitliche und räumliche Diskretisierung entsteht ein sehr großes strukturiertes nichtlineares Optimierungsmodell.

Im Berichtsjahr wurden die erforderlichen Daten erhoben und aufbereitet, dann alle Teilsysteme modelliert und zu einem Gesamtmodell zusammengefügt, und schließlich erste Testrechnungen durchgeführt. Das Berliner Abwasserentsorgungssystem besteht aus 46 Abwasserkanalnetzen für verschiedene Einzugsgebiete mit je einem Pumpwerk, dem Abwasserdruckleitungsnetz sowie (daran angeschlossen) 6 Klärwerken. Für das Druckleitungsnetz konnte ein aus Vorarbeiten vorhandenes DAE-Modell weitgehend übernommen werden; die Klärwerke wurden durch äußere Approximationen der zulässigen Kapazitätsprofile im Zeitverlauf abgebildet. Somit lag der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Modellierung der Kanalnetze mit ihren abwassertechnischen Anlagen.

Die Kanalnetze werden als Behälter aufgefasst, deren komplizierte Geometrie eine nichtlineare Beziehung zwischen Füllstand und Füllvolumen zur Folge hat („Speicherkenlinie“). Hierfür liegen diskrete Messwerte vor, die teilweise inkonsistent und – insbesondere im relevanten hohen Füllstandsbereich (Schmutzwasseraustritt!) – oft unvollständig sind. Im Projekt wurden monotone Spline-Approximationen der Speicherkenlinien entwickelt und ggf. um geeignete Extrapolationen ergänzt.

Die Kanalnetze sind teilweise untereinander wie auch mit einem System von Regenüberlaufbecken verbunden, wobei Pumpen, Schwellen, Drosseln, Heber und Rückläufe zum Einsatz kommen. Dies führt auf sehr zahlreiche und komplizierte zustandsabhängige Sprünge und Nichtdifferenzierbarkeiten für die unterschiedlichen Kopplungsmechanismen. Da einerseits die meisten Kopplungen im optimierungsrelevanten hohen Füllstandsbereich liegen und andererseits keine Erfahrungen mit eventuellen Modellvereinfachungen oder Approximationen verfügbar sind, wurde zunächst das physikalische Verhalten des Systems in einem Referenzmodell sehr detailliert abgebildet. Die Nichtdifferenzierbarkeiten hängen dabei je nach Kopplungstyp von zwei bis fünf Zustandsvariablen ab; sie wurden – teilweise bereits vereinfacht – gemischt-ganzzahlig mit *Special Ordered Sets* vom Typ 3 (SOS3) modelliert. Diese Komponenten bilden, abgesehen von der ohnehin sehr hohen Dimension, die Hauptschwierigkeit im Gesamtproblem: man erhält ein gemischt-ganzzahliges nichtlineares Optimierungsproblem mit etwa 3 Millionen Variablen (davon gut 200.000 binär) und etwa 1 Million Beschränkungen (plus einfache Schranken). Die Implementierung in GAMS (mit MINLP/NLP-Solvern Bonmin/IPopt) ist erwartungsgemäß derzeit nicht lösbar; bereits die NLP-Relaxierung benötigt 23 GB Hauptspeicher.

Die weiteren Arbeiten zielen darauf ab, zunächst lösbare (wenn auch sehr grobe) Ersatzmodelle zu konstruieren. Davon ausgehend sollen Modell und Lösungsalgorithmen (weiter-)entwickelt werden, um schließlich hinreichend genaue Lösungen des Ausgangsproblems berechnen zu können.

Analysis und Algorithmen für zustandsbeschränkte Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen.

Bearbeitet von: Anton Schiela, Martin Weiser, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Fredi Tröltzsch, Uwe Prüfert, TU Berlin; Michael Hinze, Andreas Günther, Universität Hamburg

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1

Schwerpunkt der Aktivitäten war dieses Jahr die Entwicklung und Analyse von Innere-Punkte-Methoden für zustandsbeschränkte Optimalsteuerungsprobleme mit partiellen Differentialgleichungen.

Dazu wurde zunächst eine Analyse des dazugehörigen Homotopiepfades im Funktionenraum für eine allgemeine Klasse von Problemen durchgeführt [2, 4]. Es konnten starke Konvergenz- und Regularitätseigenschaften des Pfades bewiesen werden. Allerdings kann die algorithmisch wünschenswerte Eigenschaft der strikten Zulässigkeit des Pfades nur durch Wahl einer angepassten Barrierefunktion erzielt werden.

Ein weiterer wichtiger Schritt war die Konstruktion und Analyse von passenden Finite-Elemente-Diskretisierungen unter Berücksichtigung der effizienten Auswertung der Barriereterme. Es konnten A-priori-Fehlerabschätzungen für lineare Finite Elemente gezeigt werden [1] wobei aufgrund der Struktur des Problems die Verwendung einfacher, effizienter Quadraturformeln für die Barriereterme keinen wesentlichen zusätzlichen Fehler verursacht. Man begann die Entwicklung einer zielorientierten adaptiven Verfeinerung.

Auf diesen Grundlagen baut eine effiziente, in der Schrittweite adaptive Pfadverfolgungsmethode auf. Entscheidend für die Effizienz ist dabei ein punktwiser Dämpfungsschritt, der die Struktur des Problems nutzt. Der Algorithmus besitzt eine Konvergenztheorie im Funktionenraum und hat sich in der praktischen Anwendung bewährt. Insbesondere wurde er erfolgreich im Kontext der Hyperthermieplanung eingesetzt.

Üblicherweise benötigt man für die Analyse von zustandsbeschränkten Optimalsteuerungsproblemen und deren Optimalitätsbedingungen starke Regularitätsvoraussetzungen. Dies schränkt die Klasse der analysierbaren Probleme stark ein. Mit einem neuen theoretischen Zugang konnten diese Einschränkungen deutlich abgeschwächt werden [3]. Die Anwendungen für diesen neuen Zugang sind weitreichend.

Entwicklung und Test eines numerischen Modells der Impuls-Thermografie im Bauwesen

Bearbeitet von: Martin Weiser, Bodo Erdmann, Christopher Nowzohour

Kooperationspartner: Mathias Röllig, Ralf Arndt, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Förderung: BAM

Bei der Impuls-Thermografie wird nach Erwärmung eines Bauteils der Abkühlungsprozess mit einer Infrarotkamera aufgezeichnet, so dass für jeden Punkt auf der Bauteiloberfläche eine Transiente der Oberflächentemperatur aufgezeichnet wird. Die Eigenschaften des Materials, insbesondere nahe der Oberfläche, beeinflussen die Transienten, so dass sich Inhomogenitäten und Fehlstellen erkennen lassen.

Allerdings ist schon bei an der BAM verwendeten Probekörpern mit weitgehend bekannten Materialeigenschaften die Reproduktion von Messfilmen durch numerische Simulation der Wärmeleitung schwierig.

Zunächst wurde für zwei Modellprobleme, die Impulsthermografie von Stahl und von Beton, versucht, das am ZIB entwickelte adaptive FEM-Paket KARDOS zur numerisch verlässlichen Simulation des Temperaturverlaufs zu verwenden. Dabei stellte sich heraus, dass die Temperaturverteilung an der beheizten Oberfläche eine extrem schmale Grenzschicht ausbildet. Die Auflösung dieser Grenzschicht durch adaptive Gitterverfeinerung erfordert für tolerierbare Diskretisierungsfehler eine zu hohe Verfeinerungstiefe und damit eine zu große Rechenzeit. Auch ein a priori zur beheizten Oberfläche hin anisotrop verfeinertes Gitter („Mesh grading“) war nicht ausreichend.

Eine idealisierte, translationsinvariante Thermografiesituation wurde als Volterra-Differentialgleichung formuliert, deren Lösungen quasi exakt berechnet werden können. Die Differenzen von tatsächlichen Temperaturverteilungen und Idealösung genügen wieder einer Wärmeleitungsgleichung, weisen aber keine extrem schmale Grenzschicht auf, so dass sie mit deutlich gröberen Gittern ausreichend genau diskretisiert werden konnten.

Zur Reproduktion der Messdaten war jedoch auch noch eine Anpassung der Randbedingungen und Materialparameter des Probekörpers erforderlich, insbesondere der Umgebungstemperatur, der mittleren Strahlungstemperatur, der Wärmeübergangskoeffizienten, der Wärmeleitfähigkeit und der Heizleistung. Durch die Identifizierung dieser Modellparameter konnte eine gute Übereinstimmung der Simulation mit den Messdaten erreicht werden (siehe Abbildung 2.44).

Publikationen

- [1] M. Hinze und A. Schiela, *Discretization of interior point methods for state constrained elliptic optimal control problems: Optimal error estimates and parameter adjustment*, Report 07-40, ZIB, 2007.

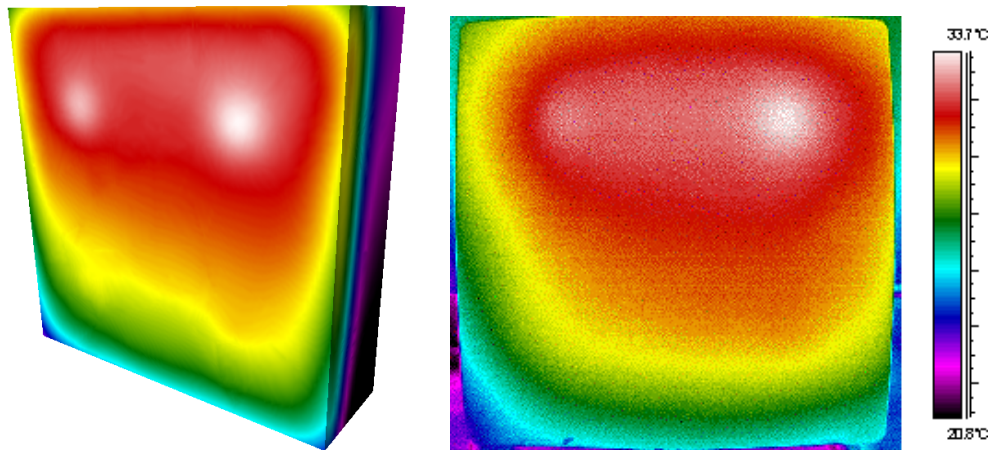


ABBILDUNG 2.44: Typische Temperaturverteilung auf einem Betonblock in der Abkühlphase (links: Simulation, rechts: Messung mit IF-Kamera). Peakwerte der Temperatur über Fehlstellen im Beton.

- [2] A. Schiela, *Barrier methods for optimal control problems with state constraints*, Report 07-07, ZIB, 2007.
- [3] A. Schiela, *Optimality conditions for convex state constrained optimal control problems with discontinuous states*, Report 07-35, ZIB, 2007.
- [4] A. Schiela, *An extended mathematical framework for barrier methods in function space*, Report 08-07, ZIB, 2008.

2.2.11 Logistik

Der Schwerpunkt Logistik beschäftigt sich einerseits mit Grundlagen und allgemeinen Methoden zur Lösung von Problemen in der Logistik und andererseits mit konkreten logistischen Anwendungsproblemen. Ein Großteil der untersuchten Probleme fällt in den Bereich der *Online-Optimierung*.

Im Berichtszeitraum hat es die folgenden Veränderungen gegeben. Die Projekte *Auslastung von Laserquellen an Roboterschweißstationen* und *Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen* sind im Berichtszeitraum ausgelaufen. Dafür sind die Projekte *Produktionsplanung im Bergbau* und *Online-Routing und Netzwerk-Spiele* neu hinzugekommen.

Im MATHEON-Projekt *B14: Kombinatorische Aspekte in der Logistik* untersuchen wir kombinatorische (Teil-)Probleme, die typischerweise bei logistischen Fragestellungen auftreten. Häufig müssen dort Entscheidungen *online* getroffen werden, das heißt, es können nur Informationen verwendet werden, die zu einem bestimmten Zeitpunkt bereits bekannt sind. Die Qualität der zu treffenden Ent-

scheidungen hängt allerdings von der künftigen Entwicklung ab, über die man oft wenig aussagen kann. Im Projekt *Kombinatorische Online-Planung* untersuchen wir Grundlagen zur Bewertung von Online-Algorithmen, wobei wir gewisse Wahrscheinlichkeitsannahmen über die Zukunft zugrunde legen.

Die in diesen beiden Grundlagenprojekten bearbeiteten Themen sind durch Praxisprojekte motiviert, die wir in Kooperation mit Industriepartnern durchführen. So haben wir z. B. im Projekt *Produktionsplanung im Bergbau* neue Optimierungsmodelle und Algorithmen für die Produktionsplanung im Tagebau und Untertagebau entwickelt, die eine wesentliche Verbesserung gegenüber den bisherigen Ansätzen darstellen.

In realen Online-Entscheidungssituationen spielen häufig *Echtzeit-Anforderungen* eine Rolle. Gute Online-Algorithmen müssen nicht nur gute Entscheidungen treffen, sondern sie müssen innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern. Dies ist z. B. bei der Steuerung von Personenaufzugssystemen der Fall. Gegenstand des Projektes *Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen* ist es, Online-Algorithmen zur Steuerung von Gruppen von Personenaufzügen für sogenannte *Zielrufsysteme* zu entwickeln, die mit extrem beschränkten Rechenressourcen auskommen müssen.

Das neue Projekt *Online-Routing und Netzwerk-Spiele* beschäftigt sich mit theoretischen Untersuchungen zu einem speziellen Mehrgüterflussproblem, bei dem Anfragen online geroutet werden müssen. Dieses Problem ist von Bedeutung bei der automatisierten Planung des Datentransfers im Internet mit kooperativen Anbietern.

Kombinatorische Aspekte in der Logistik

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Andreas Tuchscherer

Kooperationspartner: Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH; Jörg Rambau, Universität Bayreuth

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B14

Viele logistische Systeme sind technologisch hoch entwickelt, ermöglichen einen schnellen Gütertransport und bieten einen hohen Grad an Flexibilität. Die Planungs- und Steuerungssoftware für solche Systeme entspricht jedoch nicht notwendigerweise den Erwartungen der Nutzer. Beispielsweise können Transportverzögerungen auftreten und wesentliche Unausgewogenheiten in Warteschlangen entstehen, obwohl die Kapazität des Systems ausreichend erscheint, um die Transportbedarfe zu bewältigen. Die hier auftretenden Steuerungsprobleme sind üblicherweise diskreter Natur. Sie können traditioneller Art sein (offline), aber häufiger ergeben sich Online-Probleme, bei denen Entscheidungen getroffen werden müssen, bevor alle Problemdata bekannt sind.

Ziel dieses Projektes ist es, kombinatorische Online- und Offline-Probleme zu untersuchen, die in einem breiten Feld von logistischen Anwendungen auftreten. Ins-

besondere sollen *Kernmodelle* und algorithmische *Kernansätze* identifiziert und untersucht werden, die wichtig und nützlich für viele logistische Probleme sind.

Das Hauptthema ist die Modellierung von Online-Optimierungsproblemen als *Markov-Entscheidungs-Probleme* (MDP). Ziel ist die Entwicklung einer neuen Möglichkeit, Online-Algorithmen zu evaluieren. Über eine Formulierung als lineares Programm lassen sich im Erwartungswert optimale Strategien prinzipiell berechnen. Aufgrund der sehr großen Zahl von Zuständen bei realistischen Problemen kann das zugehörige lineare Programm jedoch nicht direkt gelöst werden. Ein von uns entwickeltes, auf Spaltengenerierung basierendes Verfahren ermöglicht es, *in einem Zustand* die erwarteten optimalen Kosten oder die erwarteten Kosten einer einzelnen Entscheidung (Steuerung) zu approximieren. Damit lässt sich abschätzen, wie viel man durch eine bestimmte Entscheidung gegenüber einem optimal gesteuerten System verliert. Es konnte gezeigt werden, dass für eine vorgegebene Approximationsgüte die Anzahl benötigter Variablen von lokalen Parametern abhängt, nicht jedoch von der Gesamtzahl an Zuständen im MDP [6].

Gegenwärtig untersuchen wir ein MDP-Modell für das *Online-Bin-Coloring*-Problem [9]. Hierbei konnte die spezielle Ausgestaltung des Algorithmus GreedyFit analysiert und verbessert werden sowie ein neuer Algorithmus entwickelt werden, der GreedyFit mindestens im MDP-Modell überlegen ist.

Im Bereich der Anwendungen haben wir uns im Berichtszeitraum mit dem Problem der Steuerung von Personenaufzugsgruppen beschäftigt. Für Details sei auf die Darstellungen in dem Projekt *Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen* und [7] verwiesen.

Außerdem wurde ein neues MIP-Modell von van Vyve und Wolsey [10] für das asymmetrische Traveling-Salesman-Problem (ATSP) untersucht. Moderne MIP-Löser können mit diesem Modell Probleme mit bis zu 50 Knoten direkt lösen. Wir haben festgestellt, dass kleinere Änderungen der Formulierung einen gravierenden Einfluss auf die Rechenzeit der MIP-Löser haben. Zu diesen Änderungen gehören zulässige Einschränkungen und Relaxierungen des Modells wie das Hinzufügen bzw. Weglassen redundanter Nebenbedingungen und das Ändern von Gleichungen in Ungleichungen. Für das untersuchte ATSP betrug das Verhältnis der schlechtesten und der besten Laufzeit aller Formulierungsvarianten bei Cplex 10.0 über 1.000 und bei SCIP 35 (bei Verwendung der Standardeinstellungen der Löser). Die Gründe hierfür liegen u. a. in den Möglichkeiten zum Preprocessing und in den verwendeten Branching-Strategien. In diesem Zusammenhang haben wir auch festgestellt, dass allein das Permutieren von Nebenbedingungen oder Variablen eines gegebenen MIP zu deutlichen Laufzeitunterschieden führen kann.

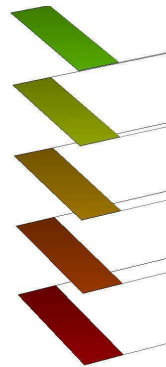


ABBILDUNG 2.45: Visualisierung einer Schnappschuss-Situation in einem Zielrufsystem. Die Farben der Passagiere (Quader) entsprechen der jeweiligen Zieletage.

Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen

Bearbeitet von: Benjamin Hiller, Andreas Tuchscherer

Kooperationspartner: Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH

In modernen Bürohochhäusern arbeiten Gruppen von Personenaufzügen zusammen, um eine effiziente Beförderung der Passagiere innerhalb des Gebäudes zu erreichen. Damit ein Aufzugssystem von den Passagieren als gut empfunden wird, ist es entscheidend, geringe Warte- und Reisezeiten zu realisieren.

Herkömmliche Aufzugssysteme arbeiten mit Außen- und Innenrufen, das heißt, ein Fahrgast teilt zuerst auf der Startetage mit, ob er aufwärts oder abwärts fahren will. Erst nach Ankunft des Fahrstuhls wählt der Fahrgast die gewünschte Zieletage in der Aufzugskabine. In den letzten Jahren sind verstärkt *Zielrufsteuerungen* entwickelt und eingesetzt worden. Dabei wählt ein Passagier bereits bei Anforderung des Aufzugs direkt die Zieletage und bekommt sofort einen Aufzug zugeteilt, der ihn befördern wird (siehe Abbildung 2.45). In einem Zielrufsystem stehen der Steuerung daher zusätzliche Informationen zur Verfügung, was für den Einsatz von Optimierungsverfahren von Vorteil ist.

Im Auftrag der Firma Kollmorgen Steuerungstechnik haben wir einen Algorithmus zur Steuerung einer Aufzugsgruppe mit Zielrufsystem entwickelt. Dieser Algorithmus kann auf den von der Firma Kollmorgen verwendeten Embedded-Mikroprozessoren, die nur über extrem knappe Rechenressourcen verfügen, in Echtzeit gute Steuerungsentscheidungen berechnen.

Wegen der knappen Rechenressourcen ist die Verwendung von rechenintensiven Methoden der Mathematischen Optimierung von vornherein ausgeschlossen. Der Algorithmus berechnet daher günstige Fahrpläne mithilfe einer Best-Insertion-Heuristik. Diese Heuristik bewertet Fahrpläne mittels einer Kostenfunktion, die

sowohl Wartezeiten als auch Reisezeiten der Passagiere berücksichtigt. Der Algorithmus wurde von der Firma Kollmorgen implementiert und wird seitdem in deren Zielrufsteuerungen eingesetzt.

Außerdem wurde eine Simulationssoftware entwickelt, mit der wir erste Leistungsvergleiche zwischen herkömmlichen und Zielrufsystemen durchführen konnten [7]. Es zeigte sich, dass durch unseren Algorithmus gesteuerte Zielrufsysteme vor allem bei hoher Last bessere Warte- und Reisezeiten liefern, wohingegen bei geringer Last herkömmliche Systeme bessere Wartezeiten bieten.

Mit unserer Simulationssoftware haben wir außerdem zwei weitere Simulationsstudien für die Firma Kollmorgen durchgeführt. Dabei ging es einmal um die geeignete Wahl der Parameter für die Heuristik. Bei der anderen Studie haben wir die Verbesserung bei Umrüstung eines Hochhauses auf ein Aufzugssystem mit Zielruf prognostiziert.

Kombinatorische Online-Planung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Benjamin Hiller

Kooperationspartner: Sven O. Krumke, TU Kaiserslautern; Tjark Vredeveld, Universität Maastricht, Niederlande

Förderung: DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*

In diesem Projekt geht es um die Entwicklung und Erforschung neuer Analysemethoden für kombinatorische OnlineProbleme und Online-Algorithmen. Die *kompetitive Analyse* und ihre Varianten, die meist zur Analyse von Online-Algorithmen benutzt werden, sind im Kern Worst-case-Analysen. Daher gibt es Online-Probleme, für die offensichtlich unterschiedlich gute Online-Algorithmen gleich schlecht abschneiden.

Online Bin Coloring [9] ist ein Problem, für das die kompetitive Analyse Aussagen liefert, die vom praktischen Standpunkt unbrauchbar sind. Bei dem Problem geht es darum, farbige Gegenstände in Behälter zu packen. Jeder Gegenstand muss sofort unwiderrufflich in einen Behälter gepackt werden; es dürfen höchstens q Behälter gleichzeitig benutzt werden. Jeder Behälter kann genau B Gegenstände aufnehmen und wird durch einen leeren Behälter ersetzt, sobald er voll ist. Ziel ist es, die maximale Anzahl verschiedener Farben in einem Behälter zu minimieren.

Ein natürlicher Algorithmus für dieses Problem ist der Algorithmus GreedyFit. GreedyFit prüft für den neuen Gegenstand zunächst, ob dessen Farbe in einem der Behälter bereits vorhanden ist. Ist dies der Fall, wird der neue Gegenstand in diesen Behälter gepackt. Andernfalls wird ein Behälter gewählt, der momentan die geringste Zahl verschiedener Farben enthält. Krumke et. al. [9] haben gezeigt, dass der triviale Algorithmus OneBin, der alle Gegenstände in denselben Behälter packt, bezüglich kompetitiver Analyse *besser* ist als GreedyFit. Dieses an sich unintuitive Ergebnis steht auch in scharfem Kontrast zu Simulationen, bei denen GreedyFit deutlich besser abschneidet [8].

Bereits vor dem Berichtszeitraum haben wir einen Markovketten-basierten Analyseansatz für das *Online-Bin-Coloring*-Problem entwickelt. Dabei wird die zeitliche Entwicklung der Verteilung der Lösungsqualität durch Markovketten beschrieben. Es zeigt sich empirisch, dass GreedyFit im Sinne der *stochastischen Dominanz* zu jedem Zeitpunkt besser ist als OneBin. Dies erklärt die Überlegenheit von GreedyFit in den Simulationen. Mithilfe eines neuen Kriteriums konnten wir Computerbeweise (Zertifikate) für diese stochastische Dominanz für bestimmte Parameter q und B bestimmen.

Im Berichtszeitraum haben wir ein weiteres Kriterium für den Vergleich von Markovketten entwickelt, das wir für einen allgemeinen analytischen Nachweis der stochastischen Dominanz zwischen GreedyFit und OneBin nutzen konnten. Damit ist die intuitive Annahme, dass GreedyFit besser ist als OneBin, mathematisch nachgewiesen. Die stochastische Dominanz zu jedem Zeitpunkt hat nämlich starke Konsequenzen:

- Das *erwartete Kompetitivitätsverhältnis* von GreedyFit ist für jede Anzahl von Gegenständen kleiner als das von OneBin.
- Die Wahrscheinlichkeit, dass GreedyFit für eine Folge von n Gegenständen k oder mehr Farben benötigt, ist kleiner als dieselbe Wahrscheinlichkeit für OneBin.
- Da die Farben in unserem Zufallsmodell gleichverteilt sind, kann man die Aussage der stochastischen Dominanz auch deterministisch interpretieren: Für jede maximale Zahl von Farben k gibt es mehr Instanzen, für die GreedyFit höchstens k Farben benötigt als für OneBin.

Eine Publikation dieses Ergebnisses ist in Vorbereitung.

Interessant ist ferner, dass es eine Anwendung von Online Bin Coloring im Kontext der Steuerung von Personenaufzügen gibt. Für die Dimensionierung von Augzugssystemen spielt der sogenannte Up-Peak eine wichtige Rolle [1]. In dieser Verkehrssituation wollen alle Aufzugspassagiere von der Zugangsetage in ihre jeweiligen Büroetagen. In einem herkömmlichen System kann eine Aufzugssteuerung nichts tun: Die Passagiere besteigen einen Aufzug, bis dieser voll ist. Dieser Aufzug muss dann an allen gewählten Zieletagen halten und kann dann nur so schnell wie möglich zur Zugangsetage zurückkehren. In einem Zielrufsystem hingegen teilt die Aufzugssteuerung einem Passagier nach Eingabe seiner Zieletage einen Aufzug zu, so dass die Aufzugssteuerung die Passagiere nach Zieletagen sortieren kann. Betrachtet man nun die Zieletagen als Farben und die q Aufzüge der Gruppe als Behälter, so funktioniert ein herkömmliches System wie OneBin, und ein Zielrufsystem kann wie GreedyFit gesteuert werden. Die Anzahl verschiedener Etagen (Farben) in einem Aufzug (Behälter) ist dann die Anzahl der nötigen Halte vor der Rückkehr zur Zugangsetage. Weniger Halte bedeuten eine frühere Rückkehr und damit eine höhere Systemleistung. Unser Ergebnis zeigt nun,

dass ein Zielrufsystem in dieser Verkehrssituation einem herkömmlichen System überlegen ist.

Wir hoffen, die entwickelten Analysetechniken auf weitere Probleme übertragen und so neue Einsichten über OnlineAlgorithmen gewinnen zu können.

Produktionsplanung im Bergbau

Bearbeitet von: Andreas Bley

Kooperationspartner: Natasha Boland, University of Melbourne, Australien; Gary Froyland, University of New South Wales, Australien; BHP Billiton Group, Melbourne, Australien; Andres Weintraub, Universidad de Chile, Chile

Kern der Produktionsplanung im Bergbau ist es zu entscheiden, in welcher Reihenfolge und mit welcher Geschwindigkeit das Gesteinsmaterial abgebaut und verarbeitet wird. Je nach Abbau- und Gesteinstyp müssen dabei bestimmte Randbedingungen beachtet werden. In einem Tagebau kann das Material zum Beispiel nur von oben nach unten abgebaut werden, wobei vom Gesteinstyp abhängige maximale Neigungswinkel der Ränder einzuhalten sind. In einem Untertagebergwerk, das nach dem Under-cut-Verfahren arbeitet, kann das Gestein dagegen nur von unten nach oben abgebaut werden. Die Festigkeit des Gesteins bestimmt dort die maximale Geschwindigkeit, mit der man sich dabei nach oben (bzw. das Gestein sich nach unten) bewegen kann, ohne dass die Stabilität des Bergwerkes gefährdet wird. Die begrenzten Abbau-, Transport- und Verarbeitungskapazitäten bedingen zahlreiche weitere Randbedingungen. So sind typischerweise die Gesamtmengen beschränkt, die innerhalb bestimmter Zeiträume in verschiedenen Teilbereichen des Tagebaus oder Bergwerkes abgebaut und verarbeitet werden können. Weitere Randbedingungen ergeben sich daraus, dass die komplexe Abbau- und Transporttechnik selbst stabile und hinreichend große Standflächen oder Räume benötigt und nur sehr eingeschränkt und mit hohen Kosten von einem Abbauort zu einem anderen bewegt werden kann.

Als sehr erfolgreich bei der Lösung solcher Probleme haben sich in den letzten Jahren Methoden erwiesen, die auf zeitlich und räumlich diskretisierten ganzzahligen Optimierungsmodellen basieren. Dabei wird der abzubauen Bereich in viele kleine Blöcke und der zu planende Zeithorizont in viele Zeitintervalle unterteilt. Die durch Abbau- und Gesteinstyp vorgeschriebenen Abbaurichtungen und Neigungswinkel können so über Reihenfolgebeziehungen zwischen den Blöcken formuliert werden, und die maximalen Abbaugeschwindigkeiten und -kapazitäten lassen sich gut als lineare Ungleichungen ausdrücken.

Zwei Probleme erschweren jedoch den Einsatz dieses Modellierungs- und Lösungsansatzes in der Praxis: Zum Einen lassen sich nicht alle im Bergbau relevanten technischen Prozesse adäquat als rein lineare ganzzahlige Programme formulieren. Die für die Lagerhalden üblicherweise eingesetzte Technik vermischt zum Beispiel die verschiedenen dort gelagerten Gesteinsarten, was im mathematischen Modell

zu nicht-konvexen nicht-linearen Nebenbindungen führt. Dadurch können diese Modelle nicht mehr nur mit den Standardtechniken der ganzzahligen Programmierung gelöst werden. Zum Anderen ist für eine hinreichend genaue Modellierung der Planungsprobleme eine relativ feine Diskretisierung des Abbaugebietes und des Zeithorizontes nötig, was bei realistischen Tagebau- und Bergwerksgrößen zu riesigen und nicht mehr praktikabel lösbaren ganzzahligen Programmen führt. Dieses Projekt soll dazu beitragen, diese beiden Herausforderungen zu meistern.

Während eines Gastaufenthaltes an der Universität Melbourne im Jahr 2006 wurde ein exakter Branch-and-bound-Algorithmus zur Lösung der speziellen nicht-linearen ganzzahligen Programme entwickelt, die die Mischung der Materialien auf den Lagerhalden berücksichtigen. Dieser Lösungsansatz basiert auf einer gemischt-ganzzahligen linearen Relaxierung des eigentlich nicht-linearen Problems und speziellen Branching-Regeln und Heuristiken zur Behandlung der auftretenden Nicht-Linearitäten. Die Rechenergebnisse zeigten, dass der Ansatz allen anderen bis dahin bekannten Ansätzen deutlich überlegen war. Im Berichtszeitraum wurden die diesem Ansatz zugrundeliegenden Techniken zur Behandlung der sich aus Mischungsprozessen ergebenden speziellen Nicht-Linearitäten im Schwerpunkt *Nichtlineare Optimierung* weiterentwickelt. Des Weiteren wurden zur Verbesserung des Verfahrens verschiedene Techniken zur Generierung von Schnittebenen-Ungleichungen untersucht, die sich aus den Reihenfolge-Beziehungen zwischen den Blöcken und den Abbau- und Verarbeitungskapazitäten herleiten lassen. Ungleichungen, die auf diesen sogenannten *precedence constrained knapsacks* basieren, wurden bereits zuvor unabhängig voneinander auf australischer Seite im Zusammenhang mit anderen Produktionsplanungsproblemen und am ZIB bei der Optimierung von Kommunikationsnetzen untersucht. Die im Berichtszeitraum durchgeführten Tests zeigten, dass die Verwendung dieser Ungleichungen zu enormen Laufzeitverbesserungen in den Produktionsplanungsproblemen führen können. Gemeinsame Artikel dazu sind derzeit in Arbeit.

Im Rahmen eines zweimonatigen Gastaufenthaltes an der Universidad de Chile wurden Ansätze zur Reduktion der Größe der bei der Produktionsplanung von Untertage-Bergwerken auftretenden ganzzahligen Programme untersucht. Dabei wurden neue Ansätze zur Aggregation der Blöcke zu größeren sogenannten Clustern entwickelt, die im Gegensatz zu den zuvor an der Universidad de Chile untersuchten Aggregationsansätzen nicht nur die Materialeigenschaften der Blöcke und deren unmittelbare Nachbarschaftsbeziehungen berücksichtigen, sondern auch die sich aus den maximalen Abbaugeschwindigkeiten und Reihenfolgebeziehungen ergebenden frühesten Anfangszeiten der Blöcke. Des Weiteren wurden alternative Problemformulierungen entwickelt, die nicht mehr den kompletten Abbau eines jeden Clusters in einem einzelnen Zeitintervall erzwingen. Dadurch können bei der Aggregation größere Cluster gebildet werden, ohne dass das resultierende aggregierte Modell wegen zu kleiner Zeitfenster für große Cluster unzulässig wird. Obwohl durch die alternative Modellierung die Anzahl der Variablen und Ne-

benbedingungen des resultierenden gemischt-ganzzahligen Programms zunächst steigt, können durch das größere Aggregationspotenzial die letztlich zu lösenden gemischt-ganzzahligen Programme ohne großen Genauigkeitsverlust weiter reduziert werden. Erste Tests dieser Ansätze zeigen vielversprechende Resultate.

Online-Routing und Netzwerk-Spiele

Bearbeitet von: Stephan Heinz, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Tobias Harks, TU Berlin; Tjark Vredeveld, Universität Maastrich, Niederlande

Die in diesem Projekt betrachteten Online-Routing-Probleme können wie folgt motiviert werden.

Um Daten im Internet von beliebigen Startknoten zu beliebigen Endknoten zu transferieren, müssen verschiedene autonome Netzanbieter diese Daten weiterleiten. Dies erfordert eine Kommunikation zwischen den verschiedenen Anbietern. Bisher basieren solche Durchleitungen auf einzeln ausgehandelten Verträgen. Für die Zukunft sind verschiedene Vorschläge zur automatisierten Planung unterbreitet worden. Damit diese funktionieren, müssen Internetanbieter entlang eines ausgewählten Weges kooperieren und entsprechende Ressourcen zur Verfügung stellen. Die Wegewahl wird dadurch erschwert, dass Datenanfragen *online* auftreten, also nicht immer antizipiert werden können. Siehe [2] für mehr Informationen.

Etwas abstrakter betrachten wir ein Mehrgüterflussproblem in dem einzelne Anfragen online geroutet werden müssen. Die Kosten der einzelnen Routings hängen von den vorher gerouteten Flüssen ab. Wir haben einen Greedy-Algorithmus zur Bestimmung solcher Flüsse untersucht, der für jede neue Anfrage ein konvexes Optimierungsproblem löst. Wir konnten zeigen, dass dieser Algorithmus für affin lineare Kostenfunktionen eine Lösung produziert, deren Kosten höchstens vier mal so groß sind wie die Kosten einer optimalen Lösung [3]. In Erweiterung dieses Resultats haben wir verschiedene untere Schranken an diesen Unterschied zu einer optimalen Lösung untersucht. Weiterhin konnten wir untere und obere Schranken für den Fall von Kostenfunktionen erhalten, die durch nichtnegative Polynome mit festem Grad gegeben sind [4]. Zudem haben wir den Fall betrachtet, in dem ein Fluss nicht aufgeteilt werden darf, also jeweils von Start- zu Zielknoten auf *einem* Pfad geroutet werden muss.

In dem oben diskutierten Modell können Routingentscheidungen, wenn sie einmal getroffen wurden, nicht wieder geändert werden und bleiben bestehen, bis die letzte Anfrage behandelt wurde. In einer Erweiterung dieses Modells haben wir den Fall untersucht, in dem die Routingentscheidungen nur innerhalb eines gegebenen Zeitfensters bestehen. Es stellt sich heraus, dass im Wesentlichen alle Resultate des obigen Falles verallgemeinert werden können. Im Detail treten jedoch einige Unterschiede zutage, siehe [4].

Die in den erwähnten Ergebnissen verwendeten Methoden sind auch in anderen Zusammenhängen nützlich. Beispielsweise kann man den Fall betrachten, in dem nach und nach Routinganforderungen auftreten, welche von autonomen Agenten erfüllt werden. Wie in der Spieltheorie verhalten sich diese Agenten so, dass sie jeweils versuchen, die geringsten Kosten für sich selber erreichen. Sie erzeugen am Ende also einen Gleichgewichtszustand, einen sogenannten Nash-Fluss. Man kann über den bei einem solchen „online Routing-Spiel“ erzeugten Fluss nun ähnliche Resultate wie in dem oben genannten Fall beweisen [5]; für weitere Details verweisen wir auf die Dissertation von Tobias Harks [2].

Publikationen

- [1] G. C. Barney, *Elevator traffic handbook: Theory and practice*, Taylor and Francis, 2002.
- [2] T. Harks, *Multicommodity routing problems – selfish behavior and online aspects*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2007.
- [3] T. Harks, S. Heinz und M. E. Pfetsch, *Competitive online multicommodity routing*, Tagungsband, Workshop on Approximation and Online Algorithms (WAOA) 2006 (T. Erlebach und C. Kaklamanis, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 4368, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, S. 240–252.
- [4] T. Harks, S. Heinz, M. E. Pfetsch und T. Vredeveld, *Online multicommodity routing with time windows*, Report 07–22, ZIB, 2007.
- [5] T. Harks und L. A. Végh, *Nonadaptive selfish routing with online demands*, Tagungsband, Combinatorial and Algorithmic Aspects of Networking, CAAN 2007 (J. C. M. Janssen und P. Pralat, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 4852, Springer-Verlag, 2007, S. 27–45.
- [6] S. Heinz, V. Kaibel, M. Peinhardt, J. Rambau und A. Tuchscherer, *LP-based local approximation for markov decision problems*, Report 06–20, ZIB, 2006.
- [7] B. Hiller und A. Tuchscherer, *Real-time destination-call elevator group control on embedded microcontrollers*, Operations Research Proceedings 2007, Springer-Verlag, 2008.
- [8] A. Höft, *Online-Optimierung einer halbautomatischen Glückwunschkartenkommisionierungsanlage*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2001.
- [9] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bin coloring*, Proceedings of the 9th Annual European Symposium on Algorithms (F. M. auf der Heide, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, S. 74–84.

- [10] M. van Vyve und L. A. Wolsey, *Approximate extended formulations*, Mathematical Programming **105** (2006), 501–511.

2.2.12 Telekommunikation

Die Telekommunikation ist eine wesentliche Schlüsseltechnologie unserer modernen Informations- und Wissensgesellschaft. In den letzten Jahren hat sie praktisch alle unsere Lebensbereiche grundlegend verändert. Mit den immer anspruchsvoller werdenden Aufgaben haben sich jedoch auch die Anforderungen an die Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit der Telekommunikationsgeräte und -netze ständig erhöht. Durch den scharfen Wettbewerb innerhalb der Branche sind die Netzbetreiber und Gerätehersteller daher gezwungen, die begrenzten Ressourcen der Netze durch Optimierung und neue Technologien bis an ihre physikalischen Grenzen auszuschöpfen, um den ständig ansteigenden Datenverkehr zu bewältigen und dabei dennoch wirtschaftlich zu arbeiten.

Das ZIB verfügt über enorme Erfahrungen in diesem Feld. Durch die Kombination von technischem Wissen mit modernsten mathematischen Methoden unterstützen wir die Entwicklungen moderner Kommunikationsnetze in beinahe allen Bereichen, etwa bei der Pufferung der Daten-Pakete in Internet-Routern, der Optimierung der Funkübertragung zwischen Mobiltelefonen und Sendemasten oder der Planung ausfallsicherer optischer Hochgeschwindigkeitsnetze. Die mathematischen Methoden, die wir dafür einsetzen, sind äußerst vielfältig. Je nach Anwendung und Problem kommen Spieltheorie, Graphenalgorithmien, lineare und ganzzahlige Optimierung oder stochastische Modelle zum Zuge. Das Spektrum unserer Arbeiten reicht dabei von der mathematischen Grundlagenforschung bis zur Umsetzung neuer algorithmischer Ideen und Konzepte in praktisch anwendbare Optimierungssoftware. Die zahlreichen Industriekontakte, extern finanzierten Projekte und Forschungsk Kooperationen im Telekommunikationsbereich belegen den Erfolg dieses Ansatzes.

Integrierte Planung von Multi-Layer-Netzen

Bearbeitet von: Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Roland Wessälly

Kooperationspartner: atesio GmbH, Berlin; University of Warwick, Vereinigtes Königreich; Nokia Siemens Networks, München; Universität Würzburg; TU Warschau, Polen

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B3; atesio GmbH, Berlin

Telekommunikationsnetze sind in Schichten (engl. *Layer*) organisiert, wie in Abbildung 2.46 illustriert. Nutzerdaten wie E-Mail, Telefon oder Video werden in IP-Paketen gekapselt, die dann wiederum über ATM, SDH und schließlich optisch über WDM übertragen werden. Die einzelnen Layer basieren auf unter-

schiedlichen Technologien und sind jeweils für spezifische Aufgaben zuständig, wie beispielsweise Routingentscheidungen, Qualitätskontrolle oder Transport. Die integrierte Planung eines solchen Netzes umfasst Entscheidungen über Auswahl, Kapazität und Hardwarekonfiguration von Standorten und deren Verbindungen, sowie das Routing von Kommunikationsbedarfen unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheit über mehrere Layer hinweg. Entscheidungen in verschiedenen Layern beeinflussen sich dabei gegenseitig.

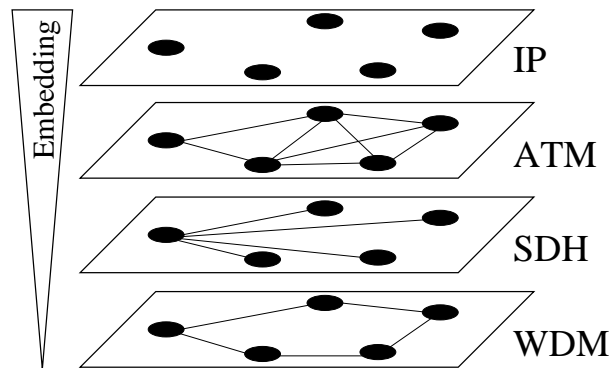


ABBILDUNG 2.46: Struktur eines Multi-Layer-Netzes.

Ziel des Projekts ist die Entwicklung von Modellen und Algorithmen zur *integrierten* Planung mehrerer Layer, um die bestehenden Abhängigkeiten besser als bisher zu berücksichtigen.

Die Arbeiten aus dem Vorjahr zu MIP-basierten Primalheuristiken, die innerhalb eines gemischt-ganzzahligen Programmes wiederum eingeschränkte Teilprobleme optimal lösen, wurden im Berichtszeitraum fortgeführt [18]. Dadurch konnten insbesondere für Multi-Layer-Szenarien mit sehr vielen parallelen logischen Links, wie sie in der Praxis häufig vorkommen, gute Lösungen deutlich schneller berechnet werden als bisher.

Um die Qualität berechneter Netzkonfigurationen besser beurteilen zu können sind Schnittebenen notwendig, die innerhalb eines Branch-and-cut-Ansatzes eine untere Schranke für die Mindestkosten eines zulässigen Netzes liefern. Wir haben daher Schnittebenen und zugehörige Separierungsverfahren aus der Single-Layer-Planung, die sich sowohl theoretisch als auch praktisch als sehr hilfreich erwiesen haben [20], auf die Planung von Multi-Layer-Netzen erweitert. Im Projekt *Multi-Layer-Transportnetze* wurden sie dazu verwendet, die Lösungszeiten bei der Planung spezieller SDH/WDM-Transportnetze von einem Tag auf wenige Stunden zu reduzieren. Damit konnten wir für realistische Planungsszenarien zeigen, dass die von uns berechneten Lösungen nahezu optimal waren [14].

Bei diesen Arbeiten hat sich ergeben, dass die Berücksichtigung von Ausfallsicherheit über mehrere Netzschichten hinweg die Problemstruktur deutlich ver-

ändert. Beispielsweise verursachen einzelne Knoten- oder Kantenausfälle auf der physikalischen Schicht, wie der Ausfall einer optischen Faser, Mehrfachausfälle auf dem logischen Layer, zum Beispiel den Ausfall mehrerer Lichtwege. Dies führt wiederum dazu, dass bekannte Eigenschaften von Lösungen grundlegender Teilprobleme, wie Ganzzahligkeit eines Minimalkosten-Flusses für einen einzelnen Bedarf, nicht mehr gelten. Hier besteht sowohl aus theoretischer als auch aus praktischer Sicht noch weiterer Forschungsbedarf. Um die Auswirkungen von Multi-Layer-Ausfallsicherheit auf die Struktur des Lösungsraums besser zu verstehen, haben wir daher damit begonnen, die polyedrische Struktur spezieller Teilprobleme unter Berücksichtigung von Multi-Layer-Ausfallsicherheit genauer zu untersuchen und bestehende Algorithmen für solche Teilprobleme an die neue Problemstruktur anzupassen. Da in der Literatur bisher meist nur einfache Knoten- oder Kantenausfälle behandelt wurden, untersuchen wir zur Zeit gemeinsam mit Michał Pióro von der Technischen Universität Warschau die Komplexität von Spaltengenerierungsverfahren für verschiedene Ausfallsicherheitskonzepte unter Berücksichtigung logischer Mehrfachausfälle. Im gleichen Themenfeld haben wir gemeinsam mit Forschern von der Universität Würzburg einen Vergleich verschiedener Ausfallsicherheitsmechanismen durchgeführt [17]. Diese Ergebnisse sollen genutzt werden, um für große ausfallsichere Multi-Layer-Netze schneller beweisbar gute Netzkonfigurationen zu berechnen.

Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle

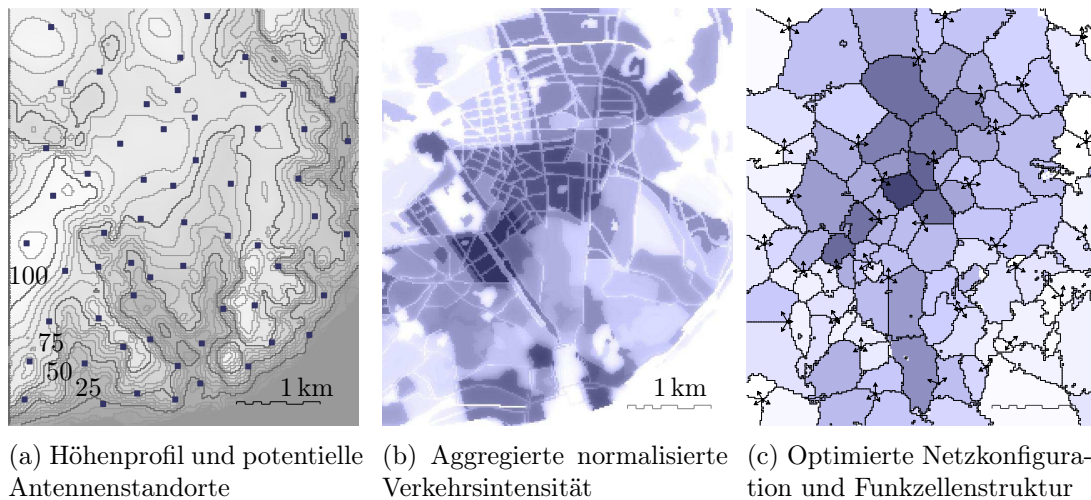
Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Hans-Florian Geerdes, Martin Grötschel

Kooperationspartner: atesio GmbH, Berlin

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B4; atesio GmbH, Berlin

Viele besitzen heute ein Mobiltelefon und verlassen sich darauf, dass es stets funktioniert. Um das tatsächlich zu gewährleisten, müssen Funknetzbetreiber ihre technische Infrastruktur gut planen. Dabei wollen sie zwei Ziele erreichen: eine möglichst große *Netzabdeckung* und ausreichende *Kapazität*. Um einen guten Preis anbieten zu können, soll der finanzielle Aufwand gleichzeitig gering sein.

Die aktuelle Generation von Mobilfunknetzen in Europa verwendet den UMTS-Standard (*Universal Mobile Telecommunications System*). Dieser Standard ermöglicht nicht nur schnelle Verbindungsgeschwindigkeiten und neue Dienste, er nutzt auch das Funkspektrum effizienter als seine Vorgängertechnologie GSM. Allerdings erschweren die technischen Systemeigenschaften, die diese Fortschritte ermöglichen, gleichzeitig die Netzplanung. Sowohl die Abdeckung, als auch die Kapazität, die ein Funknetz erzielt, hängen nämlich davon ab, wieviel Störsignale (Interferenz) insgesamt auftreten. Damit ändern sich Abdeckung und Kapazität dynamisch.



(a) Höhenprofil und potentielle Antennenstandorte (b) Aggregierte normalisierte Verkehrsintensität (c) Optimierte Netzkonfiguration und Funkzellenstruktur

ABBILDUNG 2.47: Eingangsdaten und Ergebnisse der UMTS-Planung am Beispiel von Lissabon.

In der Praxis müssen große, komplex strukturierte Datenmengen berücksichtigt werden. Zum Beispiel beeinflussen Höhenprofil (dargestellt in Abbildung 2.47a), Gebäudedaten und die technischen Eigenschaften der Funkantennen die Ausbreitung der Funksignale. Die Planung soll für eine gegebene mittlere Verkehrsintensität, wie sie zum Beispiel in Abbildung 2.47b dargestellt ist, ausreichend Kapazität bereitstellen.

Das Ziel des Projektes ist es, effektive Methoden für die Planung von UMTS-Funknetzen zu entwickeln, und die besonderen Schwierigkeiten, die diese neue Technologie mit sich bringt, zu meistern.

Ein neues mathematisches Modell eines UMTS-Funknetzes ist ein wesentlicher Beitrag des Projektes zum Stand der Forschung. Das neue Systemverständnis beruht auf *Interferenzkopplungsgleichungen* [16]; der Vorteil ist, dass die Zusammenhänge im Netz auf Zellebene dargestellt werden. Dieser Ansatz ist damit klassischen Modellen überlegen, die einzelne Nutzer detailliert abbilden. Die in den Kopplungsgleichungen auftretende Interferenzkopplungsmatrix spielt eine Hauptrolle. Mit umfangreichen Vergleichsrechnungen [12] konnte belegt werden, dass das im Projekt entwickelte, verfeinerte Modell der *Interferenzkopplungs-Komplementaritätssysteme* und die Methode der *Erwarteten Interferenzkopplung* in praktischen Planungsproblemen gute Ergebnisse erzielen. Diese Verfahren umgehen bislang übliche, aufwändige Simulationen und schätzen die Leistungsfähigkeit eines Funknetzes mit vergleichbarer Präzision ab. Außerdem sind klassische Methoden der Leistungsbewertung zu *Verallgemeinerten Polstellengleichungen* weiterentwickelt worden [13]. Diese Gleichungen beschreiben das Verhalten einzelner Zellen in einem gekoppelten Verband und erlauben neue Analysen. In einer

Diplomarbeit, die gemeinsam mit Stochastikern der TU Berlin betreut wird, werden gegenwärtig Techniken entwickelt, um Simulationen zur Leistungsbewertung zu beschleunigen.

Weil das neue Systemmodell ein UMTS-Funknetz knapp, aber präzise beschreibt, konnten im Projekt Fortschritte im Bereich der automatischen Optimierung erzielt werden. Im wesentlichen steht dabei die Frage im Vordergrund, wie die Kopplungsmatrix eines Funknetzes aussehen soll. Existierende Optimierungsmodelle wurden im Berichtszeitraum verfeinert. Insbesondere werden nun die auftretenden nichtlinearen Effekte besser berücksichtigt, indem die sogenannte *Neumann-Reihe* der Kopplungsmatrix als Zielfunktion fungiert. Das neue Optimierungsmodell ist außerdem besser für die verwendeten Suchmethoden geeignet, weil es einen günstig strukturierten Suchraum induziert. Außerdem wurden mit Hilfe der Polstellengleichungen untere Schranken für die erwartete Interferenz hergeleitet. Diese Schranken erlauben die Bewertung der Qualität des Optimierungsergebnisses. Alle neuen Verfahren wurden in breit angelegten Fallstudien überprüft. Zum Beispiel konnte innerhalb weniger Stunden die in Abbildung 2.47c dargestellte Netzkonfiguration gefunden werden. Sie ist entstanden, indem Optimierungsmethoden die Richtungen der Funkantennen einer Ausgangskonfiguration mit regulären Einstellungen individuell angepasst haben. Damit erhöhen sie die Kapazität des Netzes um knapp 10 %.

Auch andere moderne Funktechnologien sind interferenzlimitiert. Im Berichtszeitraum wurden die für UMTS erzielten Ergebnisse auf andere Technologien übertragen. Dabei wurden die Systemmodelle an die UMTS-Erweiterung HSDPA angepasst [11]. Andere Wissenschaftler haben die im Projekt erarbeiteten Methoden auf OFDM übertragen [15]. Die Forschung im Bereich W-LAN wurde vertieft [9].

Pervasive Mobile & Ambient Wireless Communications (COST 2100)

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Hans-Florian Geerdes

Kooperationspartner: TU Braunschweig, Deutschland; Linköpings Universitet, Linköping, Schweden

Förderung: European Science Foundation, COST Office

Die COST-Aktion 2100 ist neben der Aktion 293 eine weitere Fördermaßnahme der European Science Foundation (ESF), an der die Abteilung Optimierung beteiligt ist. Insgesamt nehmen 123 Einrichtungen aus weltweit 31 Ländern teil. Diese Aktion hat eine Laufzeit von 2006 bis 2010 und setzt inhaltlich die Aktivitäten der Aktion 273 fort. Die drei Arbeitsschwerpunkte der Aktion sind „Transmission Techniques and Signal Processing“, „Radio Channel“ sowie „Radio Network Aspects“. Das deckt in etwa die unteren drei Schichten des OSI-Standardmodelles für Telekommunikation ab.

Alle Themen werden mit dem Schwerpunkt auf Funksystemen behandelt. Der Arbeitsschwerpunkt „Radio Network Aspects“ hat eine enge inhaltliche Bezie-

hungen zu den Arbeiten im Projekt *Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle*. Es wird eine enge interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen Mathematikern, Informatikern und Ingenieuren, zumeist aus der Nachrichtentechnik, gepflegt. Im Berichtszeitraum fanden zwei Arbeitstreffen in Lissabon und Duisburg statt. In Lissabon war das ZIB mit einem Vortrag vertreten.

Graphs and Algorithms in Communication Networks (COST 293)

Bearbeitet von: Arie Koster (Vorsitzender, vormals ZIB, seit 01.04.2007 University of Warwick), Sebastian Orłowski (deutscher Repräsentant), Hans-Florian Geerdes, Christian Raack

Kooperationspartner: Linköpings Universitet, Schweden; University of Warwick, Vereinigtes Königreich

Förderung: European Science Foundation, COST Office

Seit Oktober 2004 ist das ZIB an der COST-Aktion 293 der European Science Foundation (ESF) beteiligt. Das Akronym COST steht für *Coopération européenne dans le domaine de la recherche scientifique et technique*. Im Rahmen der COST-Programme fördert die ESF die Europäische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der wissenschaftlichen und technischen Forschung. Die Aktion 293 beschäftigt sich innerhalb des Bereichs „Informations- und Telekommunikationstechnologien“ mit Graphenmodellen und Algorithmen für Kommunikationsnetzwerke. In diesem Projekt arbeiten Mathematiker, Informatiker und Ingenieure der Telekommunikationswissenschaften zusammen daran, interdisziplinäre Lösungen für bestehende und zukünftige Herausforderungen zu finden. Innerhalb der COST-Aktionen fördert die ESF den Austausch zwischen europäischen Forschergruppen durch die Unterstützung von Arbeitskreis-Treffen der beteiligten Wissenschaftler, Fortbildungsangebote für Doktoranden und Post-Doktoranden sowie sogenannte „Short Term Scientific Missions“ (STSM), also Kurzaufenthalte zu gezielten Forschungsthemen.

Im Berichtszeitraum wurden zwei Arbeitstreffen in Italien und eins in Slowenien organisiert, zum Teil gemeinsam mit der COST-Aktion 295, die sich mit der Planung von Funk- und Sensornetzen befasst. Bei der International Network Optimization Conference (INOC 2007) gab es eine eigene COST-293-Vortragsreihe.

Weiter wurden zwei STSMs mit Beteiligung des ZIB finanziert: Christian Raack forschte gemeinsam mit Arie Koster in Warwick an Schmittebenen für Multi-Layer-Netze; Hans-Florian Geerdes verbrachte einen Monat an der Universität in Linköping, um die Auswirkungen von Hochgeschwindigkeitserweiterungen von UMTS (HSPA) auf die Funkplanung zu untersuchen. Neben der Erweiterung des statischen Modells um HSDPA-Verkehr wurde ein Optimierungsproblem für die optimale Leistungssteuerung entwickelt und unter realistischen Annahmen gelöst [11]. Eine Veröffentlichung, die aus einem früheren STSM hervorging, bekam den „Best Paper Award“ auf der Konferenz WoWMoM 2007 [10].

Multi-Layer-Transportnetze

Bearbeitet von: Arie Koster, Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Christian Raack

Kooperationspartner: Nokia Siemens Networks (NSN), München

Förderung: NSN

In modernen Telekommunikationsnetzen werden unterschiedliche Dienste (E-Mail, Video, Telefon und Mobilfunk usw.) über ein IP/MLPS-Netz geführt, das wiederum auf einem optischen Transportnetz aufsetzt. Angesichts starker Abhängigkeiten zwischen diesen beiden Netzschichten stehen Netzbetreiber vor der Herausforderung, beide in einem integrierten Prozess so zu planen, dass alle Benutzeranforderungen zu geringen Gesamtkosten in hoher Qualität erfüllt werden können. Dies umfasst u. a. die Planung einer Topologie für beide Layer, die Dimensionierung von Hardware (Router, Multiplexer etc.) und Linkkapazitäten, sowie die Bestimmung eines Routings für gegebene Kommunikationsbedarfe. Das Routing und die zugehörigen Kapazitäten müssen so koordiniert werden, dass beim Ausfall einzelner Knoten oder Fasern genügend Kapazität vorhanden ist, um den betroffenen Verkehr umrouten zu können.

Ziel der ersten, einjährigen Phase dieses Projektes war die Erweiterung existierender Modelle und Algorithmen um Multi-Layer-Aspekte, um die Lösungszeiten zu verringern. Durch neue Modellreduktionstechniken und durch Anpassung bewährter Schnittebenen aus der Single-Layer-Planung an den Multi-Layer-Kontext konnten wir – basierend auf theoretischen Ergebnissen des Projektes MATHEON B3 – die Lösungszeiten für von NSN bereitgestellte Netzplanungsprobleme von einem Tag auf wenige Stunden reduzieren. Diese Ergebnisse werden gemeinsam mit unserem Kooperationspartner im Konferenzband der INFORMS 2008 [14] veröffentlicht. Die Algorithmen sind jetzt bei NSN im praktischen Einsatz.

Während dieser Arbeiten hat sich gezeigt, dass die Optimierung großer Netze mit Ausfallsicherheitsanforderungen nach wie vor eine Herausforderung ist. Dies liegt zum einen daran, dass die logische Schicht ein vollständiger Graph mit vielen parallelen Kanten ist, was mit steigender Netzgröße schnell zu riesigen gemischt-ganzzahligen linearen Programmen führt. Zum anderen fehlen noch Lösungsverfahren, die die spezielle Struktur von Multi-Layer-Ausfallsicherheit ausnutzen. In einer zweiten, ebenfalls einjährigen Projektphase geht es daher nun darum, in Zusammenarbeit mit NSN solche Verfahren für große ausfallsichere Zwei-Layer-Netze zu entwickeln, sie zu implementieren und an praktischen Netzinstanzen zu testen.

Efficient Integrated Backbone (Eibone)

Bearbeitet von: Andreas Bley, Roman Klähne, Christian Raack

Kooperationspartner: Nokia-Siemens Networks, München; T-Systems Enterprise Services GmbH, Berlin; Ericsson GmbH, Backnang; Alcatel-Lucent Deutschland AG, Stuttgart; CoreOptics GmbH, Nürnberg; Adaptif Photonics GmbH,

Hamburg; VPIsystems GmbH, Berlin; u2t Photonics AG, Berlin; atesio GmbH, Berlin; TU Berlin, Heinrich-Hertz-Institut; TU München; TU Hamburg-Harburg; Friedrich-Alexander-Universität, Erlangen-Nürnberg; Universität Stuttgart

Förderung: BMBF-Förderschwerpunkt Eibone (Efficient Integrated Backbone)

Klassische Telekommunikationsdienste werden in Zukunft zunehmend eine gemeinsame Netzarchitektur nutzen. Schon heute dominieren ressourcen-intensive Echtzeitanwendungen, wie Voice over IP, Online-Rollenspiele, IP-TV oder Video-on-demand den Internetverkehr. Im Mittelpunkt des bundesweiten BMBF-Vorhabens *Eibone* steht die Entwicklung von Grundlagen für ein effizientes und zuverlässiges Kommunikationsnetz, mit dem auch die Bandbreiten- und Diensteanforderungen des 21. Jahrhunderts erfüllt werden können.

Die zu untersuchenden Kernnetze werden üblicherweise in mehreren Netzschichten organisiert. Bei der Dimensionierung solcher Multi-Layer-Netze müssen Beschränkungen der verwendeten Hardware und der Technologien berücksichtigt werden. Ziel ist ein robuster und zuverlässiger Netzbetrieb mit minimalen Investitions- und Betriebskosten.

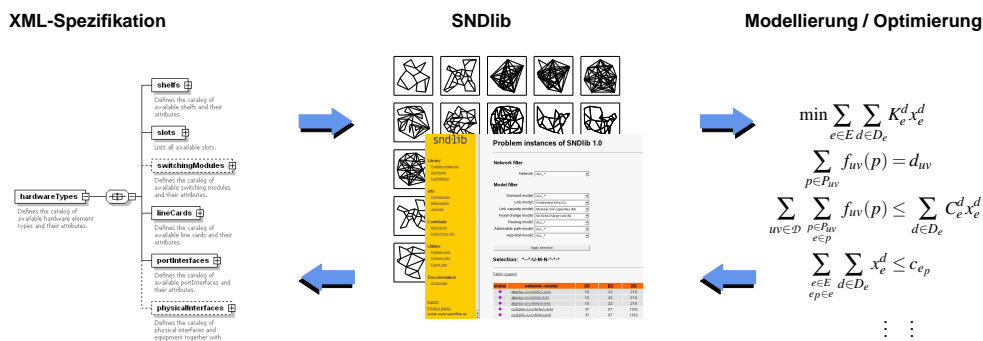


ABBILDUNG 2.48: Spezifikation und Optimierung.

Zur Beschreibung der technologischen Randbedingungen und zur Schaffung einer einheitlichen Datenbasis arbeitet das ZIB in Kooperation mit atesio und den beteiligten Systemherstellern an einer XML-Spezifikation für Multi-Layer-Netze. Diese Arbeit wurde im Berichtszeitraum weit vorangetrieben. Die Spezifikation umfasst bereits Modelle für die Knotenhardware verschiedener Technologien (IP, OTH, Ethernet, DWDM), verschiedene Verkehrsmodelle und -datensätze (statische Matrizen, Bevölkerungsmodelle, Messungen im DFN-Netz) sowie Netzdaten zu den Eibone-Referenznetzen Germany50 und Germany17. Des Weiteren wurde die XML-Schnittstelle um Kosten- und Optimierungsmodelle erweitert. Die Kostenmodelle orientieren sich an der im EU-Projekt NOBEL definierten Kostenstruktur und erlauben eine detaillierte Beschreibung von Knotenhardware. Um von technologiespezifischen Hardwaredaten, Bedarfsmatrizen und Kostenmodellen zu konkreter (mathematischer) Optimierung zu gelangen, muss in einem Zwi-

schenschnitt das eigentliche Optimierungsproblem definiert werden. Hierbei findet üblicherweise ein vom zu betrachtenden Planungsszenario abhängiger Abstraktionsprozess statt. In der XML-Schnittstelle wird dieser durch ein Optimierungsmodell beschrieben. So lassen sich verschiedene Planungsszenarien über bis zu drei Layer abstrakt und technologieunabhängig definieren. Ziel ist es, dieses oder ähnliche Modelle mit Daten aus der Hardware-, Verkehrs- und Kostenspezifikation zu füllen, um dann in einem zweiten Schritt die mathematische Modellierung und Optimierung anzustoßen (siehe Abbildung 2.48).

Zum Vergleich alternativer Netzplanungsansätze ist es nötig, Aussagen über die Qualität von Referenzlösungen machen zu können. In diesem Zusammenhang studierten wir die den Dimensionierungsproblemen zugrundeliegenden Polyeder. Wir untersuchten Seitenflächen, die auf Schnitten im Netz basieren. Die Erkenntnisse dieser Studien liefern nicht nur wertvolle Einsichten in die Struktur des Planungsproblems sondern auch darüber, wie die zugehörigen Ungleichungen effektiv zur Beschleunigung von Lösungsverfahren beitragen können. So konnte unter anderem theoretisch begründet werden, dass es für die Güte von Netzwerkschnitt-Ungleichungen von Bedeutung ist, dass der zugrunde liegende Netzwerkschnitt das Netz in zwei Komponenten zerlegt, die beide für sich jeweils zusammenhängend sind. Außerdem wurden neue facetten-definierende Ungleichungen gefunden sowie der Umgang mit mehreren Kapazitätsmodulen/Bandbreiten (mehreren Kapazitätsvariablen) untersucht. In einer algorithmischen Studie konnte nachgewiesen werden, dass Optimierungsverfahren durch den Einsatz von Netzwerkschnitt-Ungleichungen um ein Vielfaches beschleunigt werden. Die theoretischen und algorithmischen Ergebnisse sind als ZIB-Report [20, 21] verfügbar und bei der Zeitschrift *Networks* eingereicht.

Da moderne Netztopologien, wie bereits erwähnt, aus mehreren Schichten bestehen, ist es von Interesse, die oben genannten Ungleichungen auf mehr als einen Layer zu verallgemeinern. Grundlage hierfür ist die Betrachtung von Schnitten über mehrere Layer hinweg. Im Rahmen einer *Short Term Scientific Mission* des EU-Projektes *Cost 293* entwickelte Christian Raack zusammen mit Arie M. C. A Koster von der University of Warwick erste theoretische Ansätze für zweischichtige Netze. Basierend auf einem Schnitt im physikalischem Netz sind Verbindungen (logische Links) aus der darüberliegenden Schicht zu unterscheiden, die ungerade bzw. gerade viele physikalische Kanten benutzen (Abbildung 2.49). Beide Klassen

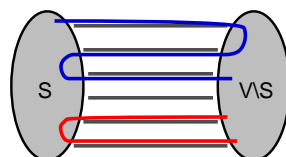


ABBILDUNG 2.49: Pfade (logische Links) über einen physikalischen Schnitt.

von logischen Links konsumieren Kapazität auf dem physikalischen Schnitt, aber nur Erstere kann auch für Datenverkehr über den Schnitt sorgen. Die mithilfe dieser Unterscheidung hergeleiteten neuen 2-layer-Netzwerkschnitt-Ungleichungen beschränken den Verkehr für Pfade, die eine gerade Anzahl (oder besonders viele) der Schnitt-Kanten enthalten.

Neben der Arbeit an der XML-Spezifikation und den theoretischen Arbeiten haben wir im Berichtszeitraum in enger Zusammenarbeit mit Ericsson einige Studien zur Multi-Layer-Optimierung durchgeführt. Ausgehend von den in Eibone definierten Referenznetzen Germany17 und Germany50 wurde ein 2-layer-Szenario (IP über DWDM) mit verschiedene Bedarfsszenarien betrachtet. Ziel war es, basierend auf Lösungen mit Qualitätsgarantien sowohl verschiedene Knotentechnologien (transparente/opaque Knoten, 2.5G/10G/40G Interfaces) als auch verschiedene Lösungsalgorithmen zu vergleichen. Als Ansatz zur Lösung dieser Optimierungsprobleme wurde am ZIB eine Dekomposition in drei Schritte gewählt. Diese umfasst die Berechnung einer logischen Topologie inklusive Grooming, die Einbettung der logischen Topologie in das physikalische Netz sowie die Wellenlängenzuweisung mit optimaler Konverterplatzierung. Jeder der Schritte wurde mit exakten primal-dualen Verfahren behandelt. Als MIP-Löser kam SCIP zum Einsatz (siehe Abschnitt 6.3).

Damit konnten komplette Netzdimensionierungen für das untersuchte 2-layer Problem bereitgestellt werden. Sowohl Lösungen als auch Methoden sollen als Grundlage für weitere abschließende Studien dienen, wobei der Fokus in Zukunft auf integrierten Ansätzen liegen wird. Unsere Algorithmen lieferten in allen Auslastungsszenarien kostengünstigere Lösungen als die von Ericsson verwendeten kombinatorischen Heuristiken. Bei der Bestimmung der dualen Gütegarantien an die Qualität der Lösungen erwiesen sich die vorangegangenen theoretischen Studien zu den Netzwerkschnitt-Ungleichungen als ausschlaggebend.

Optimierung des Wissenschaftsnetzes X-WiN

Bearbeitet von: Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Christian Raack

Kooperationspartner: DFN-Verein, Berlin

Förderung: DFN-Verein, Berlin

Das Deutsche Forschungsnetz (DFN) ist das von der Wissenschaft selbst verwaltete Hochleistungsnetz für Wissenschaft und Forschung in Deutschland. Es verbindet Hochschulen und Forschungseinrichtungen in Deutschland untereinander sowie mit den Wissenschaftsnetzen in Europa und auf anderen Kontinenten. Das X-WiN, die nunmehr fünfte Generation des nationalen Forschungsnetzes, ist seit Anfang 2006 in Betrieb. Es verbindet über 450 wissenschaftliche Einrichtungen und zahlreiche Mitnutzer in ganz Deutschland mit Anschlusskapazitäten bis zu 10 Gbit/s. Das Kernnetz des X-WiN besteht aus einer optischen Plattform mit über 6000 km Glasfaserverbindungen und zusätzlich angemieteten Wellen-

längen, die sowohl für den IP-Dienst als auch für VPN-Verbindungen genutzt werden, sowie der Routertechnik für den IP-Dienst. Das im Kernnetz gemessene IP-Verkehrsaufkommen erreichte Ende 2007 etwa 5 Petabyte pro Monat. Damit zählt das X-WiN zu den leistungsfähigsten Kommunikationsnetzen weltweit.

Bei der Gestaltung eines solchen Netzes sind zahlreiche technische und planerische Bedingungen zu beachten. So soll das Netz robust und ausfallsicher sein, geringe Paketlaufzeiten garantieren und möglichst flexibel an wachsende oder sich verändernde Verkehrsanforderungen anpassbar sein. Ziel dieses Projekts ist es, den DFN-Verein sowohl bei der Planung von Auf- und Ausbau des X-WiN als auch bei dessen Betrieb methodisch und rechenstechnisch zu unterstützen. Dazu werden die in den vergangenen Jahren entwickelten mathematischen Modelle und Algorithmen zur Optimierung von IP-Netzen ständig weiterentwickelt und verbessert. Die im Rahmen dieser Arbeiten im Berichtszeitraum abgeschlossene Dissertation „Routing and Capacity Optimization for IP Networks“ von Andreas Bley wurde mit dem GOR-Dissertationpreis 2007 ausgezeichnet [3, 4]; verschiedene theoretische Beiträge daraus wurden in Journalen veröffentlicht beziehungsweise zur Veröffentlichung akzeptiert [1, 2].

Allerdings werden die zu lösenden praktischen Planungsprobleme immer größer und komplexer. Neben den Fragen der klassischen Kapazitäts- und Routingoptimierung für IP-Netze, wie beispielsweise der Auswahl geeigneter Routinggewichte, spielen mittlerweile auch Fragestellungen aus der Multi-Layer-Netzplanung eine entscheidende Rolle, so etwa die Einbettung der optischen Verbindungen in das Glasfasernetz. Um dem Rechnung zu tragen, wurde im Berichtszeitraum in enger Kooperation mit den Projekten *Eibone* und *Integrierte Planung von Multi-Layer-Netzen* auch an der Untersuchung dieser Fragestellungen gearbeitet.

Ein sichtbares Zeichen für den praktischen Erfolg dieses Projektes ist es, dass der DFN-Verein das in den Vorjahren gemeinsam mit dem ZIB zur Anbindung von Standorten der mittleren Netzebene an das innere Kernnetz entwickelte Nachbarlösungs-Konzept [5, 19] seit 2006 auch seinen übrigen Einrichtungen für die ausfallsichere und kostengünstige Anbindung an das X-WiN anbietet.

100GET

Bearbeitet von: Andreas Bley, Roland Wessälly

Kooperationspartner: Alcatel-Lucent Deutschland, Stuttgart; ADVA Optical Networking, München; Deutsche Telekom, Bonn; Ericsson, Backnang; Nokia Siemens Networks, München; MICRAM Microelectronics, Bochum; IHP Microelectronics, Frankfurt/Oder; Agilent Technologies, Hamburg; Core Optics, Nürnberg; u2t Photonics, Berlin; VPI Systems, Berlin; JDSU Deutschland, Eningen; atesio, Berlin; Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik – Heinrich-Hertz-Institut, Berlin; TU Braunschweig; TU Dresden; TU Hamburg-Harburg; TU München; Universität Dortmund; Universität Kiel; Universität Stuttgart; Universität Würz-

burg; Alcatel Thales III-V Lab, Marcoussis, Frankreich; IntexyS, L'Union, Frankreich; Universität Limoges, Frankreich; Ericsson, Stockholm, Schweden; Acreo, Kista, Schweden; Chalmers Universität, Göteborg, Schweden; Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden; SP Devices, Linköping, Schweden

Förderung: BMBF-Förderschwerpunkt 100GET

In den letzten Jahren hat die Verbreitung von Ethernet als Übertragungstechnologie in breitbandigen Datennetzen stark zugenommen. Im deutschen Wissenschaftsnetz X-WiN kommen zum Beispiel fast nur noch 1 Gbit/s und 10 Gbit/s Ethernet-Verbindungen zum Einsatz; die im Vorgängernetz G-WiN verwendete SDH-Technologie wurde fast vollständig verdrängt. Aufgrund der deutlich geringeren Kosten von Ethernet im Vergleich zu anderen Technologien ist davon auszugehen, dass IP/Ethernet die dominierende Technologie der kommenden Jahre sein wird. Im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunktes „100Gbit/s Carrier-Grade Ethernet Transport Technologies“ (100GET) sollen die Grundlagen für die zukünftige 100Gbit/s Ethernet-Übertragungstechnik und die darauf basierenden Netze entwickelt werden.

Eines der Ziele ist es, die technischen und ökonomischen Implikationen des Einsatzes von 100Gbit/s-Ethernet-Technologie in den Kommunikationsnetzen besser zu verstehen und damit zukünftige Netze besser planen zu können. Die durch neue ressourcenintensive Anwendungen wie Audio- und Video-Streaming und die zunehmende Verlagerung der klassischen Telefonie auf IP-Verkehr stark steigenden Anschlussbandbreiten bei den Endkunden erzwingen auch immer höhere Bandbreiten in den Aggregations- und Kernnetzen. Ein Netzbetreiber muss beim Ausbau seines Netzes unter anderem entscheiden, ob er im Kern- oder Metro-Netz parallel zur IP-Plattform ein Ethernet-basiertes Netz für ausgewählte Dienste aufbauen soll, wie viele Ebenen und Standorte das IP-Kernnetz haben sollte, oder in welchem Maße sich die IP-Infrastruktur in die Aggregationsbereiche ausdehnen sollte. Welche technische Lösung bei welchen Kosten- und Bedarfsstrukturen aus ökonomischer Sicht zu bevorzugen ist, ist momentan noch völlig unklar.

Gemeinsam mit atesio und anderen Projektpartnern sollen die Voraussetzungen geschaffen werden, derartige Fragen beantworten zu können. Schwerpunkt der Arbeiten am ZIB ist dabei die Entwicklung mathematischer Modelle und Lösungsmethoden, die eine vergleichende Bewertung verschiedener Netzarchitekturvarianten und Konzepte für unterschiedliche Verkehrs-, Technologie- und Kostenszenarien erlauben. Im Mittelpunkt stehen dabei der Zuschnitt von Core-, Metro- und Zugangs-Netzen, die Auswahl der geeigneten Übertragungstechnologien und Komponenten für die jeweiligen Netzelemente, sowie die Verkehrsführung in und zwischen den Netzbereichen. Technische und betriebliche Aspekte wie etwa die Hardwareeigenschaften der verschiedenen technologischen Schichten (z. B. Schalt- und Routinggranularitäten, verschiedene optische und elektronische Techniken) und Qualitäts- und Ausfallsicherheitsanforderungen zukünftiger Breitbanddienste müssen angemessen berücksichtigt werden.

Zur praktischen Bewertung der verschiedenen Netzarchitekturvarianten sollen schließlich gemeinsam mit den Projektpartnern atesio und Deutsche Telekom Rechnungen für verschiedene Referenzszenarien im Rahmen einer techno-ökonomischen Studie durchgeführt werden.

Analyse der Verzögerung von Datenpaketen in IP-Netzen

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt, HU Berlin; Detecon International, Dresden

Förderung: Detecon International, Dresden

Für die Sicherung einer vorgegebenen Dienstqualität in IP-Netzen erfolgt neben einer Zulassungskontrolle, vgl. [8], eine Aufteilung der verschiedenen an einem Link eintreffenden Paket-Ströme auf unterschiedliche Warteschlangen, verbunden mit einer Wahl der Reihenfolge für die Bearbeitung der Pakete. Durch Priorisierung der Warteschlangen, vgl. [6], oder durch eine Implementierung von gewichtetem *Round-Robin* beziehungsweise von gewichtetem paketweisem *Head-of-the-Line Processor-Sharing* (*Weighted Fair Queueing*: WFQ), vgl. [7], kann eine entsprechende Aufteilung der Linkkapazität auf die zu transportierenden Paket-Ströme gewährleistet werden.

Als erstes Modell analysieren wir die Verzögerung der IP-Pakete für den Fall einer einzigen Warteschlange. Der Ankunftsprozess der Pakete am Link wird durch einen *Interrupted Poisson Process* (IPP) modelliert, bei dem sich exponentiell verteilte *On*- und *Off*-Phasen abwechseln. Während der *On*-Phasen kommen Pakete zufälliger Länge entsprechend einem Poisson-Prozess an, während der *Off*-Phasen kommen keine Pakete an. Die Pakete werden mit konstanter Geschwindigkeit (Linkrate) entsprechend der FIFO-Disziplin bedient. Aus mathematischer Sicht wird die Verteilung der Verweilzeit in dem Warteschlangen-System IPP/GI/1/ ∞ analysiert.

Für das System IPP/GI/1/ ∞ ist die Laplace-Stieltjes-Transformierte (LST) der Verweilzeit explizit darstellbar. Die Verteilung der Verweilzeit ergibt sich durch Invertierung der LST mittels numerischer Integration. Aufgrund der Parameterverhältnisse bei Strömen von IP-Paketen ist der numerischen Stabilität bei der Integration besondere Aufmerksamkeit zu widmen. Die ersten beiden Momente der Zeitdauern, in denen Pakete bedient (*Busy period*) beziehungsweise keine Pakete bedient werden (*Empty period*), lassen sich ebenfalls explizit angeben.

Als zweites Modell analysieren wir die Verzögerung der IP-Pakete einer markierten Warteschlange mit endlichem Puffer unter Prioritäten-Scheduling. Für die markierte Warteschlange bedeutet das Prioritäten-Scheduling, dass ihre Bedienung nach einer zufälligen Dauer U bei Beendigung der Bedienung eines gerade bedienten Paketes für eine zufällige Dauer D unterbrochen wird. Als Approximation dieses Mechanismus können für U und D Cox-verteilte Zufallsvariable

gewählt werden. Der Ankunftsprozess der Pakete wird wieder durch einen IPP und die Länge der Pakete durch eine Erlang-Verteilung modelliert. Aus mathematischer Sicht wird die Verteilung der Verweilzeit in dem Warteschlangen-System $IPP/E_r/1/b$ mit einer zufälligen Umgebung analysiert.

Die stationäre Verteilung der System-Zustände und damit die Verlustwahrscheinlichkeit sowie die mittlere Verweilzeit der Pakete sind durch Lösung der Balance-Gleichungen berechenbar. Die ersten beiden Momente der Verweilzeit lassen sich anschließend effizient über rekursive Darstellungen für die ersten beiden Momente der bedingten Verweilzeiten bestimmen.

Publikationen

- [1] A. Bley, *Approximability of unsplittable shortest path routing problems*, Report 06-02, ZIB, 2006.
- [2] A. Bley, *Inapproximability results for the inverse shortest paths problem with integer lengths and unique shortest paths*, Networks **50** (2007), 29–36.
- [3] A. Bley, *Routing and capacity optimization for IP networks*, Tagungsband der Operations Research, 2007.
- [4] A. Bley, *Routing and capacity optimization for IP networks*, Dissertation, TU Berlin, 2007.
- [5] A. Bley und M. Pattloch, *Modellierung und Optimierung der X-WiN Plattform*, DFN-Mitteilungen **67** (2005), 4–7.
- [6] A. Brandt und M. Brandt, *On the two-class M/M/1 system under preemptive resume and impatience of the prioritized customers*, Queueing Systems **47** (2004), 147–168.
- [7] A. Brandt und M. Brandt, *On the stability of the multi-queue multi-server processor sharing with limited service*, Queueing Systems **56** (2007), 1–8.
- [8] A. Brandt, M. Brandt, S. Rugel und D. Weber, *Admission control for real-time traffic: improving performance of mobile networks by operating on actual throughput*, Tagungsband der IEEE Wireless Communications & Networking Conference (WCNC) 2005, New Orleans, USA, 2005.
- [9] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und I. Siomina, *Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment*, Tagungsband der WoWMoM'07, IEEE, 2007.
- [10] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und I. Siomina, *Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment*, Tagungsband der WoWMoM'07, IEEE, 2007.

- [11] H.-F. Geerdes, *Dynamic aspects in W-CDMA: HSPA performance*, STSM scientific report, COST 293 (GRAAL), 2007.
- [12] H.-F. Geerdes, *UMTS radio network planning: Mastering cell coupling for capacity optimization*, Dissertation, TU Berlin, 2008.
- [13] H.-F. Geerdes und A. Eisenblätter, *Reconciling theory and practice: A revised pole equation for W-CDMA cell powers*, Tagungsband der MSWIM'07, 2007.
- [14] A. Koster, S. Orłowski, C. Raack, G. Baier und T. Engel, *Single-layer cuts for multi-layer network design problems*, Telecommunications Modeling, Policy and Technology (B. Golden, S. Raghavan und E. Wasil, Hg.), Springer-Verlag, 2008, Konferenzband der 9. INFORMS Telecommunications Conference, S. 1–24.
- [15] K. Majewski, U. Türke, X. Huang und B. Bonk, *Analytical cell load assessment in OFDM radio networks*, Tagungsband IEEE PIMRC'07, 2007.
- [16] L. Mendo und J. M. Hernando, *On dimension reduction for the power control problem*, IEEE Trans. Comm. **49** (2001), Nr. 2, 243–248.
- [17] M. Menth, R. Martin, A. Koster und S. Orłowski, *Overview of resilience mechanisms based on multipath structures*, Tagungsband der DRCN 2007, La Rochelle, Frankreich, Oktober 2007.
- [18] S. Orłowski, A. Koster, C. Raack und R. Wessälly, *Two-layer network design by branch-and-cut featuring MIP-based heuristics*, Tagungsband der INOC 2007, Spa, Belgien, April 2007.
- [19] J. Pattloch, *Mehr Verfügbarkeit im X-WiN*, DFN-Mitteilungen **69** (2005), 4–6.
- [20] C. Raack, A. Koster, S. Orłowski und R. Wessälly, *Capacitated network design using general flow-cutset inequalities*, Tagungsband der INOC 2007, Spa, Belgien, April 2007.
- [21] C. Raack, A. Koster und R. Wessälly, *On the strength of cut-based inequalities for capacitated network design polyhedra*, Report 07-08, ZIB, 2007.

2.2.13 Verifikation

Sowohl die Komplexität von Hard- und Softwaresystemen als auch unsere Abhängigkeit von ihnen nimmt auf allen Ebenen beständig zu. Die Anzahl der Transistoren in integrierten Schaltkreisen bricht Jahr für Jahr neue Rekorde, und die Anzahl der verbauten Mikroprozessoren steigt immer weiter an. Seien es Waschmaschinen, Autos oder Fabrikanlagen, ohne komplexe Hard- und Softwaresysteme

geht nichts mehr. Andererseits steigt mit zunehmender Komplexität der Aufwand, die Korrektheit dieser Systeme zu testen. Die Simulation ist seit langem ein bewährtes Mittel zum Testen. Durch das Größenwachstum wird der Anteil der während der Tests simulierten Zustände eines Chips aber immer kleiner, und somit werden die Resultate immer unsicherer. Einen Ausweg bietet möglicherweise die formale Verifikation, die mathematisch die Richtigkeit eines Systems beweist. Die Probleme, die sich hierbei stellen, sind allerdings vielfältig und ebenfalls komplex. In diesem Gebiet ist es insbesondere gleichermaßen schwierig wie notwendig, die Theorie mit der Praxis zusammenzuführen, um mit praktisch nutzbringenden Resultaten die Sicherheit unserer Systeme zu verbessern.

Im Rahmen dieses Schwerpunktes haben wir uns im Berichtszeitraum mit zwei sehr unterschiedlichen aber ausgesprochen praxisrelevanten Aspekten auseinandergesetzt. Nach den Erfolgen bei den bisherigen Projekten zur Beschleunigung der Verifikation von arithmetischen Schaltkreisen stellte sich die Frage nach der Praxistauglichkeit der Ergebnisse. Da es hier zu allererst um den Beweis der Unzulässigkeit von ganzzahligen Programmen geht, sind numerische Ungenauigkeiten, die bei der Optimierung einer Zielfunktion unerheblich wären, plötzlich nicht mehr hinnehmbar. Wir arbeiten daher, auch ausgehend von den Ergebnissen des Basisverifizierers *perPlex* (siehe Abschnitt 6.3) an der Implementierung eines exakten IP-Lösers auf Basis von SCIP (siehe das Projekt *Exakte ganzzahlige Programmierung* aus dem Bereich ganzzahlige Optimierung Abschnitt 2.2.8).

Ein anderes Problem welches im praktischen Einsatz von Verifikationsverfahren auftritt, ergibt sich durch die Frage, wieviel des Chips man bereits verifiziert hat. Derzeit geben die verwendeten Verfahren nur die Antworten „alles“ oder „noch nicht genug“. Hier ein Maß für den Fortschritt des Verifikationsprozesses zu finden, ist aus praktischer Sicht sehr interessant, da sonst der Einsatz in einem industriellen Umfeld mit engen Terminvorgaben schwierig ist. Mathematisch lässt sich dies auf das Zählen von Lösungen von Constraint Integer Programs abbilden. Aufbauend auf der in den letzten Jahren erstellten Software in diesem Bereich konnten wir die Leistungsfähigkeit der Programme erheblich steigern.

Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Stefan Heinz, Thorsten Koch

Kooperationspartner: OneSpin Solutions GmbH, München

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D17

Der größte Anteil der Entwicklungsarbeit in der Chipherstellung besteht aus der Validierung des Schaltungsentwurfs und der verschiedenen Zwischenergebnisse auf dem Weg zum ersten Prototypen des Chips. Laut Infineon liegt dieser Anteil zwischen 60 % und 80 %. Die Technik der (Software) Simulation von Chip Designs ist seit Jahren nicht mehr in der Lage, die Korrektheit komplexer Mikrochip-Designs in einer vernünftigen Zeit zu evaluieren. Daher gewinnen Techniken wie

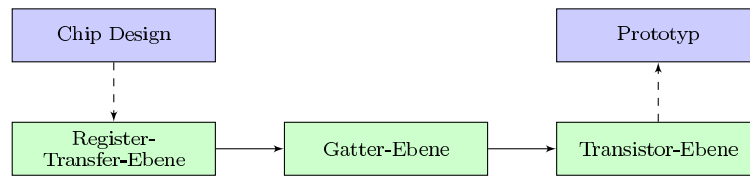


ABBILDUNG 2.50: Unterschiedliche Mikrochip Design Levels.

die formale Verifikation immer mehr an Bedeutung in der Praxis.

Der Schaltungsentwurf eines Chips durchläuft während der Entwicklung verschiedene Darstellungsebenen. Diese sind in Abbildung 2.50 illustriert. Beginnend mit der Spezifikation der Schaltung (Chip Design) in einer Hardware-Beschreibungssprache – wie z. B. Verilog oder VHDL – wird der Entwurf in die so genannte Register-Transfer-Ebene umgesetzt, aus der eine Darstellung auf Gatter-Ebene und schließlich auf Transistor-Ebene erzeugt wird. In der formalen Verifikation werden bisher Techniken verwendet, die auf der Gatter-Ebene ansetzen. Dabei wird die Gatternetzliste gemeinsam mit einer zu prüfenden Eigenschaft in ein „Satisfiability“-Problem (SAT) transformiert. Diese SAT-Instanz wird dann mit SAT-Algorithmen gelöst. Bei Schaltungen, die arithmetische Operationen implementieren, stößt dieser Ansatz allerdings auf Komplexitätsprobleme.

Das ZIB entwickelte in enger Zusammenarbeit mit der Industrie erfolgreich Beweistechniken, die sich an der Register-Transfer-Ebene (RT-Ebene) orientieren [3]. Auf der RT-Ebene sind die Register nicht vollständig in Bits zerlegt, sondern werden als ganze Zahlen entsprechender Bitbreite behandelt. Durch diese Technik können strukturelle Eigenschaften der Schaltung für den Beweis einer Eigenschaft besser ausgenutzt werden. Dadurch gelingt es, einige Schaltungen mit für SAT-Löser schwierigen arithmetischen Operationen deutlich effizienter zu verifizieren.

Der Ansatz des ZIB ist es, das Verifikationsproblem auf RT-Ebene als Constraint Integer Program (CIP) zu modellieren und mit einer Kombination von Techniken der gemischt ganzzahligen Programmierung und des Constraint Programming zu lösen. Dazu wird das am ZIB entwickelte Paket SCIP [1, 2] zur Lösung von CIPs eingesetzt.

In Abbildung 2.51 haben wir versucht, die Komplexitätsentwicklung für die SAT- und CIP-Technik darzustellen. Dazu haben wir einen Schaltkreis verwendet, der eine Multiplikation beschreibt. Dieses Design wurde mit unterschiedlichen Registerbreiten auf Korrektheit überprüft (abgetragen auf der x-Achse). Als SAT-Löser wurde MiniSat 2.0 verwendet. Die Abbildung zeigt, dass für kleine Registerbreiten die SAT-Technik die CIP-Technik in der Laufzeit (y-Achse) dominiert. Dies liegt hauptsächlich daran, dass der SAT-Ansatz wesentlich effizienter mit dem Hauptspeicher agieren kann, welcher die Struktur des Schaltkreises verwaltet, als die CIP-Technik. Mit zunehmender Registerbreite gewinnt die CIP-

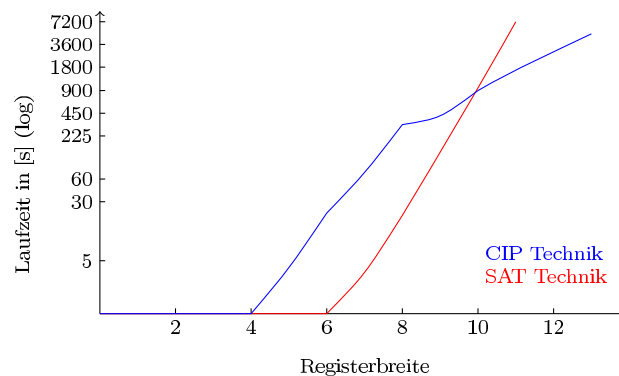


ABBILDUNG 2.51: Multiplikationsschaltkreise („booth signed“) mit unterschiedlichen Registerbreiten. [2]

Methode an Relevanz und dominiert den SAT-Ansatz. Das heißt, für größere Probleminstanzen zahlt sich der strukturerhaltende Ansatz aus.

Im Berichtsjahr wurde ein Prototyp der entstandenen Verifikations-Software zu Testzwecken an unseren Industriepartner, die Firma OneSpin Solutions GmbH, übergeben. Diese testet die Software an relevanten Praxisbeispielen. Dabei hat sich, neben der Weiterentwicklung der Algorithmen, folgende Problemstellung ergeben: Es ist für den praktischen Einsatz der Software von essentieller Wichtigkeit, dass ein unzulässiges Teilproblem durch ein Zertifikat unterlegt wird. Ein solches Zertifikat gibt einen Beweis für die Unzulässigkeit. Falls ein Problem fälschlich als unzulässig erklärt wird, führt das dazu, dass möglicherweise ein Fehler im Mikrochip Design übersehen wird. Dies kann erhebliche Kosten nach sich ziehen. Im Berichtszeitraum haben wir mit der Bearbeitung dieser Problematik begonnen. Dabei arbeiten wir eng zusammen mit dem ZIB-Projekt *Exakte ganzzahlige Programmierung* aus dem Bereich Ganzzahlige Optimierung (Abschnitt 2.2.8).

Berechnung eines Vollständigkeitsmaßes für Eigenschaftsprüfungen in der Chipverifikation

Bearbeitet von: Stefan Heinz, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Jörg Bormann, OneSpin Solutions GmbH, München

Förderung: OneSpin Solutions GmbH, München

Im Projekt *Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen* beschäftigt man sich mit dem Problem der Prüfung von Eigenschaften gegen ein Chip-Design, um Fehler im Design zu finden. Die entwickelten Techniken zur Lösung dieser Probleme zeigen, dass es möglich ist, für bestimmte Arten von Mikrochips diese formalen Beweise in vernünftiger Zeit zu beweisen [3]. Jedoch ist es nicht möglich, mit diesem Verfahren die *globale* Korrektheit eines Mikrochips aufzuzeigen, das heißt, zu beweisen, dass für *jedes* zulässige Eingabemuster eines Designs immer

Beispiel	Eigenschaften	alte Version	neu Version	Beschleunigung
ARBITER	5	2.5 s	0.26 s	9.6
Simple SDRAM	4	1.8 s	0.43 s	4.1
SDRAM	18	199.6 s	22.13 s	9.0
HOST	7	–	46.72 s	∞

Tabelle 2.1: Laufzeitentwicklungen für ausgewählte Beispiele

eine korrekte Ausgabe erzeugt wird. Diese Problematik wird in diesem Projekt untersucht.

Die Firma OneSpin Solutions GmbH (im folgenden mit OneSpin bezeichnet) hat für dieses Problem ein theoretisches Verfahren entwickelt, welches die globale Korrektheit eines Mikrochip-Designs beweisen kann [5]. Darüber hinaus ist die Methode in der Lage ein Maß anzugeben, welches den Fortschritt der Validierung abbildet.

Das Verfahren evaluiert, ob eine Menge von Eigenschaften ausreicht, um das Verhalten eines Chip-Designs *komplett* zu beschreiben. Falls dies der Fall ist folgt, dass das untersuchte Design *global* korrekt ist. Das Fortschrittsmaß ist dabei eine Zahl zwischen 0 und 1 und erfüllt notwendigerweise zwei Eigenschaften: (i) das Maß darf genau dann und nur dann 1 sein, wenn die Korrektheit der Schaltung vollständig bewiesen ist; (ii) das Maß muss monoton steigend sein, d. h. wenn man weitere Eigenschaften hinzufügt, so darf das neue Maß nicht kleiner als das alte Maß sein.

In diesem Projekt haben wir uns damit beschäftigt, zu analysieren, inwieweit es machbar ist, diese Technik auf relevante Beispiele anzuwenden. Zu diesem Zweck haben wir die entwickelten Methoden aus dem Projekt *Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen* verallgemeinert. Zur Lösung dieser Aufgabe ist es von Bedeutung, für bestimmte Constraint Integer Programs (CIPs) alle zulässigen Lösungen zu zählen. Es ist bekannt, dass dieses Problem zur Klasse $\#P$ gehört.

Es stellte sich heraus, dass das vorgeschlagene Maß nicht praktikabel ist, da es schon für kleine Beispiele an der Komplexität scheitert. Dieses Komplexitätsproblem haben wir durch eine Modifizierung des Algorithmus gelöst. Durch diese Modifizierung ist uns gelungen, ein reales Chip-Design (einen SDRAM) mit allen seinen Eigenschaften zu evaluieren. In Abbildung 2.52 haben wir die Entwicklung des Maßes für den SDRAM dargestellt. Dabei haben wir die Entstehungsreihenfolge verwendet, die uns durch OneSpin vorgegeben wurde.

Im Berichtszeitraum haben wir die Algorithmen, die genutzt werden um das Maß zu berechnen, drastisch verbessert. Damit war es uns möglich, weitere Chip-Designs zu berechnen. In Tabelle 2.1 haben wir Laufzeitverbesserungen für einige Beispiele dargestellt.

Des weiteren haben wir im Berichtsjahr das Zählen von Lösungen auf allgemeine CIPs verallgemeinert und in das Software-Paket SCIP inkludiert [4]. Damit ist es nun möglich, die Anzahl der zulässigen Lösungen eines beliebigen CIPs zu zählen.

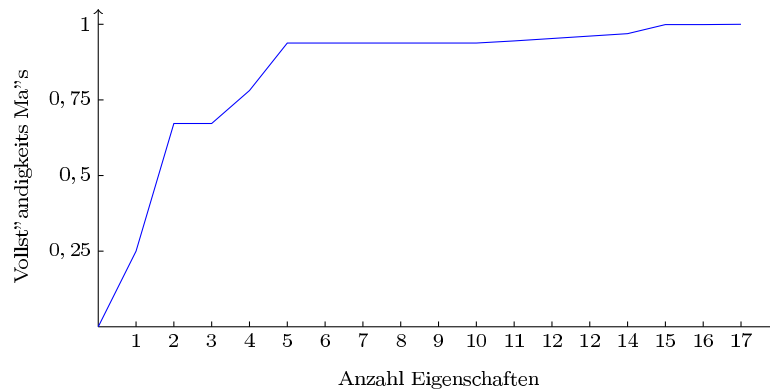


ABBILDUNG 2.52: Entwicklung des Vollständigkeitsmaßes für einen SDRAM mit 17 Eigenschaften.

Dies ist insbesondere in den Bereichen interessant, in denen man an mehreren optimalen Lösungen interessiert ist.

Publikationen

- [1] T. Achterberg, *SCIP - a framework to integrate constraint and mixed integer programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [2] T. Achterberg, *Constraint integer programming*, Dissertation, TU Berlin, 2007.
- [3] T. Achterberg, R. Brinkmann und M. Wedler, *Property checking with constraint integer programming*, Report 07-37, ZIB, 2007.
- [4] T. Achterberg, S. Heinz und T. Koch, *Counting solutions of integer programs using unrestricted subtree detection*, CPAIOR 2008, 2008, to appear.
- [5] J. Bormann und H. Busch, *Method for determining the quality of a set of properties, applicable for the verification and specification of circuits*, European Patent, 2007, EP1764715 (A1).

2.2.14 Verkehr

Unsere Gruppe arbeitet seit 15 Jahren an mathematischen Methoden der Verkehrsplanung. Ein Schwerpunkt ist die Entwicklung von Verfahren zur Lösung von sehr großen, zunehmend auch von integrierten Modellen, bei denen mehrere Schritte im Planungsprozess bzw. im Betriebsablauf im Gesamtzusammenhang betrachtet werden. Wir haben in der Vergangenheit verschiedene Probleme der klassischen *operativen Planung* im Nah- und Luftverkehr bearbeitet. Unsere Verfahren zur Umlauf-, Dienst- und zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung

im Nahverkehr sowie zur Pairing-Optimierung im Luftverkehr werden in den industriellen Planungssystemen Microbus 2 der IVU Traffic Technologies AG und NetLine der Lufthansa Systems GmbH vermarktet und aktuell von etwa 40 Verkehrsbetrieben und Fluggesellschaften im In- und Ausland eingesetzt. Einsparungen und Verbesserungen durch den Einsatz dieser Tools sind dokumentiert.

Wir haben das Augenmerk nun auf die der operativen Planung vor- und nachgelagerten Felder gerichtet. Die Projekte *Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr*, *Trassenbörse* und *Cost Sharing* befassen sich mit der Erstellung des Verkehrsangebots im Nah- und Bahnverkehr. Mathematisch führen diese Probleme auf anspruchsvolle Modelle, in denen Aspekte aus den Schwerpunkten *Ganzzahlige Optimierung* und *Nichtlineare Optimierung* (Abschnitte 2.2.8 und 2.2.10), sowie der stochastischen Optimierung, der Auktions- und Spieltheorie auftreten; im Bereich der Netzplanung gibt es auch Ähnlichkeiten mit Ansätzen aus dem Schwerpunkt *Telekommunikation* (Abschnitt 2.2.12). Im Projekt *Betriebshofmanagement* geht es um die Steuerung von Betriebsabläufen mit Anknüpfungspunkten zu Methoden aus dem Schwerpunkt *Logistik*, insbesondere zu Online- und Routingverfahren.

Unser Ziel ist, für diese Probleme geeignete mathematische Optimierungsmethoden zu entwickeln und in derselben Weise als *Best Practice* zu etablieren, wie dies in der operativen Planung bereits der Fall ist.

Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Marika Neumann, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Christian Liebchen, Rolf Möhring, Sebastian Stiller, TU Berlin; IVU Traffic Technologies AG, Berlin; ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH; Luis Torres, Ramiro Torres, EPN Quito;

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B15

In der Angebotsplanung geht es um den Entwurf von Nahverkehrssystemen, die einen guten Service für die Fahrgäste bieten und kostengünstig für den Betreiber sein sollen. Üblicherweise wird diese Aufgabe in mehrere Schritte aufgeteilt, die der Planung des Netzes, des Linienverlaufs, der Taktzeiten und des Fahrplans entsprechen; außerdem werden die Fahrpreise festgelegt.

Ziel dieses Projektes ist es, die Teilschritte der Angebotsplanung mit mathematischen Optimierungsmethoden zu lösen und sie schrittweise in den wichtigsten Teilen zu integrieren. Die einzelnen Planungsschritte erweisen sich aber bereits als schwierig. Es ist deshalb wichtig, diese Probleme theoretisch zu untersuchen und gute Algorithmen zu ihrer Lösung zu finden. Im Berichtszeitraum haben wir die Optimierungsmodelle zur Linien- und Preisplanung weiterentwickelt, ein alternatives Modell zur Berechnung eines Fahrplans entwickelt und Berechnungen zur sequentiellen Linien- und Fahrplanung durchgeführt.



ABBILDUNG 2.53: Linienminimaler Linienplan für Potsdam aufgeschlüsselt nach den drei Transporttypen (von links Stadtbus, Regionalbus, Tram).

In der *Linienplanung* sollen Linien (d. h. Linienverlauf und Frequenz) für eine Infrastruktur bestimmt werden, so dass ein gegebenes festes Passagieraufkommen transportiert werden kann. Dabei muss eine Abwägung zwischen Servicequalität (etwa geringe Fahrzeit) und Kosten vorgenommen werden.

Unsere Modellierung des Linienplanungsproblems [3, 2] basiert auf einem Mehrgüterflussansatz, der Reisewege von Passagieren und den Verlauf von Linien im Netz miteinander verknüpft. Die LP-Relaxierung dieses Modells konnten wir bereits in der letzten Berichtsperiode mit Spaltenerzeugungsverfahren für eine mittelgroße Stadt wie Potsdam in wenigen Minuten lösen; die dort auftretenden Pricing-Probleme führen auf kardinalitätsbeschränkte Längste-Wege-Probleme, die im Projekt *Kardinalitätsbeschränkte kombinatorische Optimierung* untersucht werden (Abschnitt 2.2.9). Für die gemischt-ganzzahlige Version des Problems konnten wir im letzten Jahr durch die Weiterentwicklung unseres Branch-and-cut-Algorithmus die Dualitätslücke zwischen bester zulässiger Lösung und unterer Schranke für unsere Testinstanzen bis auf wenige Prozent reduzieren. Diese Erfolge basieren auf polyedrischen Analysen des Linienplanungsproblems, durch die wir Klassen von Schnittungleichungen ableiten konnten. Eine Variante des Linienplanungsproblems, bei der die Linienanzahl minimiert wird, können wir auf diese Weise für das gesamte Potsdamer Netz bereits beweisbar optimal lösen. In Abbildung 2.53 ist ein solcher linienminimaler Linienplan dargestellt. Unser Code basiert auf dem CIP-Framework SCIP, siehe Abschnitt 6.3.

Neben unseren allgemeinen Untersuchungen zum Linienplanungsproblem haben wir in einem Projekt mit der Universität Quito ein Linienplanungsmodell speziell für die Stadt Quito untersucht. In Quito ist der Nahverkehr in „Korridoren“ organisiert, d. h. die Passagiere werden hauptsächlich entlang einer Route mit we-

nigen Abzweigungen befördert. Die Linienplanung bezieht sich hier auf besondere Netzwerktopologien, die typisch für Quito sind und für die wir besonders schnelle Spezialverfahren entwickelt haben.

In der *integrierten Fahr- und Linienplanung* geht es darum, einen Fahr- und Linienplan zu finden, der sowohl Passagier- als auch Unternehmensinteressen berücksichtigt. Einerseits sollen die Kosten des Linienangebots minimiert werden. Andererseits sollen die Fahrzeiten der Passagiere inklusive Umsteige- und Wartezeiten, die sich aus einem Fahrplan ergeben, berücksichtigt werden. Im letzten Jahr haben wir in unserem Linienplanungstool Schnittstellen implementiert die es uns ermöglichen, zunächst sequentiell Linien- und Fahrpläne zu berechnen und diese Berechnungen in einem weiteren Schritt zu iterieren. Derzeit führen wir erste iterative Berechnungen durch und analysieren die Ergebnisse. Des weiteren planen wir Linienpläne auf „taktfreundliche“ Strukturen hin auszulegen, d. h. auf ein Zusammenwirken von verschiedenen Linienverläufen, die gewisse (geringe) Umsteigezeiten bedingen.

Im letzten Jahr haben wir außerdem ein alternatives Modell zur Fahrplanung entwickelt, das nicht wie die in der Literatur üblichen Modelle auf einem Periodic-Event-Scheduling-Ansatz basiert, sondern auf einem zeitexpandierten Graphen. Dieses Modell führt zu größeren ganzzahligen Programmen, liefert aber auch beweisbar bessere untere Schranken. Zur Zeit testen wir dieses Modell rechnerisch.

Ziel der *Preisplanung* ist der Entwurf eines Preissystems mit verschiedenen Fahrkartentypen, so dass z. B. die Wirtschaftlichkeit eines Nahverkehrsunternehmens erhöht werden kann. Dabei nehmen wir an, dass das Verhalten der Passagiere in Abhängigkeit von den Preisen durch eine Nachfragefunktion beschrieben werden kann. Im Berichtszeitraum haben wir die in den Vorjahren entwickelten nichtlinearen Modelle zur Maximierung der Einnahmen [4, 5, 16, 17], der Nachfrage und des Gewinns um Aspekte der Maximierung der sozialen Wohlfahrt erweitert. Die Ansätze in der wirtschaftswissenschaftlichen Literatur zur Berechnung der sozialen Wohlfahrt beziehen sich im Allgemeinen auf eindimensionale und invertierbare Nachfragefunktionen. Da unsere Ansätze eine mehrdimensionale Nachfragefunktion voraussetzen, schlagen wir eine andere Herangehensweise zur Berechnung der sozialen Wohlfahrt mit Hilfe eines Konzeptes vor, das wir als *User benefit* bezeichnen. Für all unsere Modelle lassen sich mit Hilfe von Standard-NLP-Lösern verschiedene Preissysteme für das Netz von Potsdam optimieren.

Trassenbörse

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Thomas Schlechte

Kooperationspartner: Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), TU Berlin; Institut für Volkswirtschaftslehre und Wirtschaftsrecht, Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik

(WIP), TU Berlin; IMP Ilgmann, Miethner & Partner Unternehmensberatung, Berlin; Institut für Verkehrswesen, Eisenbahnbau und -betrieb (IVE), Universität Hannover

Förderung: Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

Das Projekt Trassenbörse verfolgt das Ziel, Methoden für eine effiziente Vermarktung von Trassen für den Schienenverkehr zu entwickeln.

Zusammen mit Wissenschaftlern aus den Bereichen Schienenfahrwege und Bahnbetrieb, Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik bearbeiten wir dieses Thema in einem interdisziplinären Forschungsvorhaben. Dabei steht die Entwicklung einer Marktordnung, die eine optimale Nutzung des Schienennetzes ermöglicht, im Zentrum der Überlegungen. Untrennbar damit verbunden ist der Einsatz fortgeschrittener Planungsmethoden und die Entwicklung spezieller Softwarekomponenten zur Lösung der in den verschiedenen Bereichen auftretenden Probleme.

Der grundsätzliche Ansatz besteht darin, mit einer Auktion sicherzustellen, dass bei konkurrierenden Netzansprüchen (z. B. bei Flaschenhälsen, engl. Bottlenecks) die Nachfrager mit der höchsten Zahlungsbereitschaft zum Zuge kommen. Ein geeignetes Design und Regelwerk für eine derartige komplexe kombinatorische Auktion wird von unserem Projektpartner WIP entwickelt – ein Auktionsmechanismus, der transparent und fair, aber auch immun gegenüber möglichen Manipulationen sein muss.

Die in einer solchen Auktion verwendete Abbildung des Systems Schiene muss einerseits genau genug sein, um alle Zugtrassen, die verauktioniert werden, hinterher auch konfliktfrei fahren zu können. Andererseits darf das Modell aber nicht durch überflüssige Details überfrachtet werden, z. B. durch eine weichengenaue Darstellung aller Bahnhöfe. Allein die Berechnung aller realisierbaren Fahrzeiten durch Simulationstools würde ansonsten schon bei kleinen Szenarien an ihre Grenzen stoßen.

Unsere Projektpartner vom SFWBB und IVE forschen zur Lösung dieser Problematik an zwei korrespondierenden Modellen unterschiedlicher Granularität. Neben einer mikroskopische Sichtweise zur gleis- und weichengenaue Simulation individueller Züge, die letztendlich die Umsetzbarkeit des speziellen Zuges gemäß dem aktuellen Stand der Betriebssimulation gewährleistet, wird an einem makroskopischen Modell der Infrastruktur mit standardisierten Annahmen im Hinblick auf die Zugeigenschaften und deren Fahrdynamiken gearbeitet.

Solche standardisierten Modelle sind die Voraussetzung, um das kombinatorische Problem der Trassenallokation als ein mathematisches Optimierungsproblem aufzufassen und mit Methoden der ganzzahligen Optimierung lösen zu können. Die Optimierungsaufgabe besteht darin, in jeder Auktionsrunde aus einer Vielzahl unterschiedlicher Gebote für Fahrtrassen diejenige Kombination zu ermitteln, die zum einen konfliktfrei ist und zum anderen den Nutzen des Netzes maximiert. Ein geeignetes ganzzahliges Optimierungsmodell (OPTRA) wurde zu Beginn des

Projektes entwickelt – diese Arbeiten sind ebenso wie der Gesamtentwurf einer Trassenbörse in [1] dokumentiert.

Bei der weiteren Untersuchung des Trassenallokationsproblems führte uns das Auftreten spezieller Konflikt-Strukturen bereits in der Vorperiode zu neuen mathematischen Modellen vom Typ einer „Extended formulation“. Dabei werden Bedingungen durch zusätzliche Variablen ersetzt. Dies hat Vorteile hinsichtlich der Lösbarkeit von großen Instanzen, da solche Modell durch Spaltenerzeugungsverfahren gelöst werden können. Wir konnten mittlerweile theoretisch nachweisen, dass diese Ansätze zu besseren unteren Schranken führen und beweisbar effizient, d. h. in polynomialer Zeit, berechnet werden können. Probleme haben wir noch bei der Berechnung primaler Lösungen für große Instanzen, für die wir noch keine konsistent guten Ergebnisse erzielen. Wir arbeiten derzeit an der Integration von Bündeltechniken, die die Voraussetzung für die Verwendung von sog. „Rapid branching“-Primalheuristiken sind. Diese Verfahren haben sich in der Vergangenheit bei der Lösung sehr großer integrierter Umlauf- und Dienstplanungsprobleme bewährt. Da unsere Modelle ähnliche Strukturen enthalten (sie integrieren die Belegung von Strecken und die Wahl von Trassen), erhoffen wir uns ähnliche Ergebnisse. Diese Techniken und ein Vergleich aller betrachteter Modelle sind in den Veröffentlichungen [6] und [7] beschrieben und führten zur Entwicklung einer Spezialsoftware TS-OPT, siehe auch Abschnitt 6.3.

Im Gegensatz zur traditionellen Vorgehensweise, historisch gewachsene Fahrpläne nur lokal und stückweise zu verändern, liefert unser Ansatz auch die Möglichkeit komplett neue und innovative Fahrplankonzepte auf eine globale, netzweite Weise zu betrachten, zu optimieren und zu analysieren. Neben den offensichtlichen Einsatzmöglichkeiten bei der Fahrplanerstellung sehen wir auch großes Potential darin, unsere Verfahren zur Evaluierung verschiedener langfristiger Infrastrukturmaßnahmen einzusetzen.

Betriebshofmanagement

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Carlos Henrique Cardonha

Kooperationspartner: PSI Transcom GmbH, Berlin

Förderung: CNPq (National Counsel of Technological and Scientific Development – Brasilien)

Die Zuordnung von Fahrzeugen zu Stellplätzen und zu Umläufen ist das Kernproblem des sog. Betriebshofmanagements und der Schlüssel zu einem leichtgängigen Arbeitsablauf in öffentlichen Verkehrs- oder Eisenbahnunternehmen [21]. Die Aufgabe wird dadurch zu einem Problem, dass die Stellplätze in Spuren angeordnet sind, die nicht beliebig befahren oder verlassen werden können. Spuren können manchmal nur in einer Richtung befahren werden, und ein Fahrzeug, das in der Mitte einer Spur geparkt ist, kann nur benutzt werden, wenn sein Weg frei ist. Das Hauptziel dieses neuen Projekts ist es, Methoden zu entwickeln, die den Ver-

kehrunternehmen helfen, den Arbeitsablauf insbesondere während der Stoßzeiten zu verbessern.

Es gibt verschiedene Versionen des Betriebshofmanagement-Problems für Busse, Trams und Züge [23, 20, 10, 12, 13, 22, 23]. Die einfachste Version ist die Zuordnung von Umläufen zu Stellplätzen, so dass das morgendliche Ausrücken ohne Rangieren erfolgen kann. Schwierigere Versionen ergeben sich durch die Einbeziehung von Gleistopologien für Straßenbahnen und Züge, die Bildung von Zügen, Reihenfolgebedingungen, die Betrachtung aufeinanderfolgender Betriebstage, Betriebshofwechsel von Fahrzeugen usw.

Wir haben in der Berichtsperiode eine Familie von ganzzahligen Optimierungsmodellen entwickelt, die Fragestellungen vom einfachen Ausrückproblem bis zu komplexen mehrperiodischen, betriebshofübergreifenden Fragestellungen formalisieren. Erste Testrechnungen für einfachere Varianten mit realen Datensätzen unseres Kooperationspartners verliefen sehr vielversprechend. Wir untersuchen derzeit die Eignung von Lagrange-Verfahren zur Lösung komplexerer Instanzen. In Kooperation mit den Kollegen aus dem Schwerpunkt *Logistik* (Abschnitt 2.2.11) arbeiten wir an Ansätzen zur Lösung der Online-Version des Problems.

Das Problem der Anordnung von Fahrzeugen in Spuren gehört zu einer allgemeineren Klasse von Problemen des Managements von Objekten in Stapeln oder Puffern. Andere interessante Probleme dieser Sorte sind Bahnverspätungsmanagement, Flugverspätungsmanagement, die Containerladung sowie der Betrieb von Hochregallagern [11]. Bei allen diesen Problemen geht es um die Zuordnung von Objekten zu Positionen in einem oder mehreren Stapeln. Dabei treten Bedingungen an die Stapelungen wie LIFO, FIFO usw. auf, für deren Behandlung wir allgemeine verwendbare Methoden entwickeln wollen.

Cost-sharing

Bearbeitet von: Nam Dung Hoang

Förderung: ZIB (Konrad-Zuse-Stipendium)

Cost-sharing ist die Verteilung von Gemeinkosten auf die Nutzer eines Systems. Produktionsgesellschaften verteilen Gemeinkosten auf unterschiedliche Abteilungen und Produkte. Luftfahrtbehörden legen Landungsgebühren für Flugzeuge fest [14]. Eisenbahninfrastrukturunternehmen bestimmen Nutzungsgebühren für Trassen. Verkehrsunternehmen legen Fahrpreise fest. Auch bei freiwilliger Kooperation treten Cost-sharing-Probleme auf, zum Beispiel wenn man die Kosten von Transportnetzen [8, 9] oder die Bau- und Betriebskosten von Wasser-, Gas-, oder Telekommunikationsnetzen [19, 25] reduzieren will. Das sind nur einige von zahlreichen Beispielen für Cost-sharing-Probleme. Die zentrale Frage ist, wie man die Kosten verteilen soll. Die Kostenallokation muss fair sein, damit alle Parteien bereit sind, sich an den Kosten zu beteiligen.

Aus mathematischer Sicht ist das Cost-sharing-Problem eine Art von Spiel, in dem Kosten unter unterschiedlichen Mitgliedern einer Organisation aufgeteilt werden. Die kooperative Spieltheorie liefert die Werkzeuge zur Berechnung optimaler Strategien. Wir haben dazu Konzepte der kooperativen Spieltheorie, wie zum Beispiel den Kern, den Kernel, den Nucleolus [15, 18, 24] oder den Shapley-Wert, betrachtet und auf Cost-sharing-Spiele angewendet. Dabei erweisen sich der Nucleolus und seine Variationen, wie z. B. schwacher oder proportionaler Nucleolus, als besonders interessant für unseren Zweck. Sie definieren Kostenallokationen, die zuerst den kleinsten und dann den zweitkleinsten, drittkleinsten, usw., „Gewinn“ aller möglichen Koalitionen, die die Teilnehmer bilden können, maximieren. Unter Gewinn kann man den absoluten, durchschnittlichen oder relativen Gewinn verstehen. Auf diese Weise wird der Anreiz für eine beliebige Koalition, das System zu verlassen, minimiert.

Die Bestimmung des Nucleolus und seiner Varianten kann als ein Optimierungsproblem formuliert werden, das in vielen Spielen NP-schwer ist. Im allgemeinen müssen wir dazu ein Lineares Programm mit einer in der Anzahl der Spieler exponentiell großen Anzahl an Nebenbedingungen lösen. Die rechten Seiten der Nebenbedingungen sind zudem meistens nur implizit als Lösungen untergeordneter kombinatorischer Optimierungsprobleme gegeben. Wir haben damit begonnen, Schnittebenenmethoden zu entwerfen, um den Nucleolus und seine Variationen zu berechnen, indem sukzessive Nebenbedingungen generiert und hinzugefügt werden.

Als Anwendungsproblem untersuchen wir die Berechnung fairer Preise für den öffentlichen Nahverkehr. Wir werten derzeit erste Testrechnungen für ein Testnetz aus, wobei wir die Ergebnisse mit Preissystemen vergleichen, die mit alternativen Ansätzen im Projekt *Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr* (Abschnitt 2.2.14) berechnet worden sind.

Die nächsten Ziele sind die Erforschung weiterer Eigenschaften des Nucleolus und seiner Variationen, die Verbesserung der Algorithmen und die Untersuchung weiterer Anwendungen. Eine der offenen Fragen ist, wie stabil spieltheoretische Allokationen gegen Änderungen von Kosten sind. Stabilität ist sehr wichtig, da die Kosten meistens nur approximiert werden und sich im Laufe eines Projektes von der Planung bis zur Fertigstellung ändern können.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel, S. Lukac, K. Mitusch, T. Schlechte, S. Schultz und A. Tanner, *An auctioning approach to railway slot allocation*, *Competition and Regulation in Network Industries* **1** (2006), Nr. 2, 163–196.
- [2] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *A column-generation approach to line planning in public transport*, *Transportation Science* **41** (2007), 123–132.

-
- [3] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *Models for line planning in public transport*, Proceedings of the 9th International Conference on Computer-aided Systems in Public Transport (CASPT 2004) (M. Hickman, P. Mirchandani und S. Voß, Hg.), Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Bd. 600, Springer-Verlag, 2008, S. 363–378.
 - [4] R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, *Fare planning in public transport*, Report 05–20, ZIB, 2005.
 - [5] R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, *Optimal fares for public transport*, Proceedings of Operations Research 2005 (H. Haasis, Hg.), Springer-Verlag, 2006, S. 29–36.
 - [6] R. Borndörfer und T. Schlechte, *Models for railway track allocation*, Proceeding of the 7th Workshop on Algorithmic Approaches for Transportation Modeling, Optimization, and Systems (ATMOS 2007) (C. Liebchen, R. K. Ahuja und J. A. Mesa, Hg.), Internationales Begegnungs- und Forschungszentrum für Informatik (IBFI), Schloss Dagstuhl, Germany, 2007.
 - [7] R. Borndörfer und T. Schlechte, *Models for railway track allocation problems*, Report 07-20, ZIB, 2007.
 - [8] S. Engevall, M. Göthe-Lundgren und P. Värbrand, *The traveling salesman game: An application of cost allocation in a gas and oil company*, Annals of Operations Research **82** (1998), 453–471.
 - [9] V. Fragnelli, *Game theoretic analysis of transportation problems*, Proceedings of the 4th Twente Workshop on Cooperative Game Theory joint with 3rd Dutch-Russian Symposium, 2005, S. 27–38.
 - [10] F. Gallo, G. und Di Miele, *Dispatching buses in parking depots*, Transportation Science **35** (2001), Nr. 3, 322–330.
 - [11] K. Günther, H.-O. und Kim (Hg.), *Container terminals and automated transport systems*, Springer, Berlin, 2005.
 - [12] M. Hamdouni, G. Desaulniers, O. Marcotte, F. Soumis und M. van Putten, *Dispatching buses in a depot using block patterns*, GERAD’s thematic workshop on Optimization in Public Transit, Montreal, Canada, 2004.
 - [13] M. Hamdouni, F. Soumis und G. Desaulniers, *Dispatching buses in a depot minimizing mismatches*, 7th IMACS International Symposium on Iterative Methods in Scientific Computing, Toronto, Canada, 2005.
 - [14] S. Littlechild und G. Thompson, *Aircraft landing fees: A game theory approach*, The Bell Journal of Economics and Management Science **8** (1977), 186–204.

- [15] M. Maschler, B. Peleg und L. S. Shapley, *Geometric properties of the kernel, nucleolus, and related solution concepts*, Mathematics of Operations Research **4** (1979), 303–338.
- [16] M. Neumann, *Mathematische Preisplanung im ÖPNV*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [17] M. Neumann, *Fare planning for public transport*, Proceedings of Operations Research 2006 (K. Waldmann und U. Stocker, Hg.), Springer-Verlag, 2006, S. 61–66.
- [18] D. Schmeidler, *The nucleolus of a characteristic function game*, SIAM Journal on Applied Mathematics **17** (1969), 1163–1170.
- [19] W. W. Sharkey, *Network models in economics*, In M. O. Ball et al., editors, *Handbook in Operations Research and Management Science: Network Routing*, vol. 8, Elsevier, Amsterdam, 1995, pp. 713–765.
- [20] R. F. und D. Huisman und L. Kroon und R. Lentink, *Shunting of passenger train units in a railway station*, ERIM Report Series Research in Management, 2002.
- [21] W. E. und D. Prigge, *Wertschöpfungspotenziale im betriebshof besser nutzen*, Der Betrieb (2002).
- [22] L. K. und R. Lentink und A. Schrijver, *Shunting of passenger train units: an integrated approach*, www.cwi.nl/lex/files/PlanningOfShuntTracks.pdf.
- [23] T. W. und U. Zimmermann, *Real-time dispatch of trams in storage yards*, 2000.
- [24] H. P. Young, *Cost allocation*, In R. J. Aumann and S. Hart, editors, *Handbook of Game Theory*, vol. 2, North-Holland, Amsterdam, 1994, pp. 1193–1235.
- [25] H. P. Young, N. Okada und T. Hashimoto, *Cost allocation in water resources development*, Water Resources Research **18** (1982), 361–373.

2.2.15 Verteilte Systeme und Anwendungen

In der Arbeitsgruppe *Computer Science Research* werden seit mehreren Jahren Algorithmen und Methoden für das Management und die Nutzung verteilter, dynamischer Systeme erforscht. Ausgehend von den derzeit vorhandenen Grid-Systemen, die zumeist auf der Grundlage traditioneller Client/Server-Architekturen entwickelt wurden, beschäftigt sich die Arbeitsgruppe mit dem Einsatz neuer Peer-to-Peer-Techniken in Grid-Systemen [18, 15, 13]. Sie bieten den Vorteil

einer potentiell unbegrenzten Skalierbarkeit, d. h., es können ohne Leistungseinbuße beliebig viele Nutzer gleichzeitig bedient werden. Da jeder neu hinzukommende Knoten auch zugleich Dienstleistungen erbringt, besitzen Peer-to-Peer-Systeme eine höhere Ausfallsicherheit als traditionelle Grid-Systeme, was für den praktischen Einsatz in dynamischen Systemen besonders wichtig ist. Auch die selbständige Rekonfiguration bei Komponentenausfällen wird durch Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

Im Zentrum unserer Forschungsarbeiten steht das Management sehr großer verteilter Datenmengen. Unter der Bezeichnung *ZIB-DMS* entwickeln wir skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung von Dateien in verteilten Systemen. Im Gegensatz zu existierenden hierarchischen Dateisystemen, wie dem Network File System NFS, ermöglicht unser ZIB-DMS den Datenzugriff über frei wählbare Attribut-Wertepaare: Der Nutzer spezifiziert die gewünschte Datei nicht über den Dateinamen und Speicherort, sondern über inhaltsbezogene Angaben (Attribute). Da die verteilten Speicherkomponenten jederzeit ausfallen können oder aufgrund von Netzwerkstörungen zeitweise nicht zugreifbar sind, ist eine Replikation der Dateien unabdingbar. Dafür entwickeln wir Methoden zur Datenplatzierung, Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Im Rahmen der EU-Projekte SELFMAN und XtremOS haben wir Probleme der Transaktionsverwaltung in Internet-verteilten Systemen gelöst. Durch einen Majority-Ansatz, basierend auf replizierten Daten, sind unsere Algorithmen in der Lage auch bei Ausfällen einzelner Komponenten konsistente Schreiboperationen zu realisieren. Als prototypische Anwendung realisieren wir eine peer-to-peer-verteilte Version der Online-Enzyklopädie Wikipedia.

XtremOS – das Betriebssystem für das Grid

Bearbeitet von: Felix Hupfeld, Björn Kolbeck, Alexander Reinefeld, Thorsten Schütt, Jan Stender, Christian Lorenz

Kooperationspartner: INRIA/IRISA, Frankreich; STFC, Vereinigtes Königreich; CNR, Italien; EADS, Frankreich; EDF, Frankreich; EDGE, Frankreich; NEC, Deutschland; SAP Research, Deutschland; BSC, Spanien; Universität Ulm, Deutschland; Vrije Unversiteit Amsterdam, Niederlande; XLAB, Slowenien; T6, Italien; ICT, China; Red Flag Software, China; Telefonica I+D, Spanien

Förderung: Europäische Union

Im EU-Projekt XtremOS wird ein verteiltes Grid-Betriebssystem entwickelt, das im Gegensatz zum Globus-Toolkit nicht als separate Softwareschicht auf den darunter liegenden Betriebs- und Kommunikationssystemen aufsetzt, sondern vollständig in ein Linux-Betriebssystem integriert ist. Als Grundlage wird der am französischen INRIA entwickelte „Kerrighed“-Linux-Kernel genutzt, der um solche integrierte Dienste erweitert wird, die eine globale Sicht auf die im Grid verfügbaren Ressourcen ermöglichen.

Unsere Arbeitsgruppe ist für die Entwicklung des verteilten Dateisystems *XtreemFS* verantwortlich. Dafür verwenden wir eine objektbasierte Speicherarchitektur, bei der die Dateiinhalte von den Datei-Metadaten getrennt gespeichert werden. Die Inhalte der Dateien, die so genannten „Objects“, werden auf „Object Storage Devices“ (OSDs) gespeichert, auf denen alle Lese- und Schreiboperationen ausgeführt werden. Metadaten werden in Metadatenservern gespeichert, auf die nur bei wenigen Operationen zugegriffen werden muss.

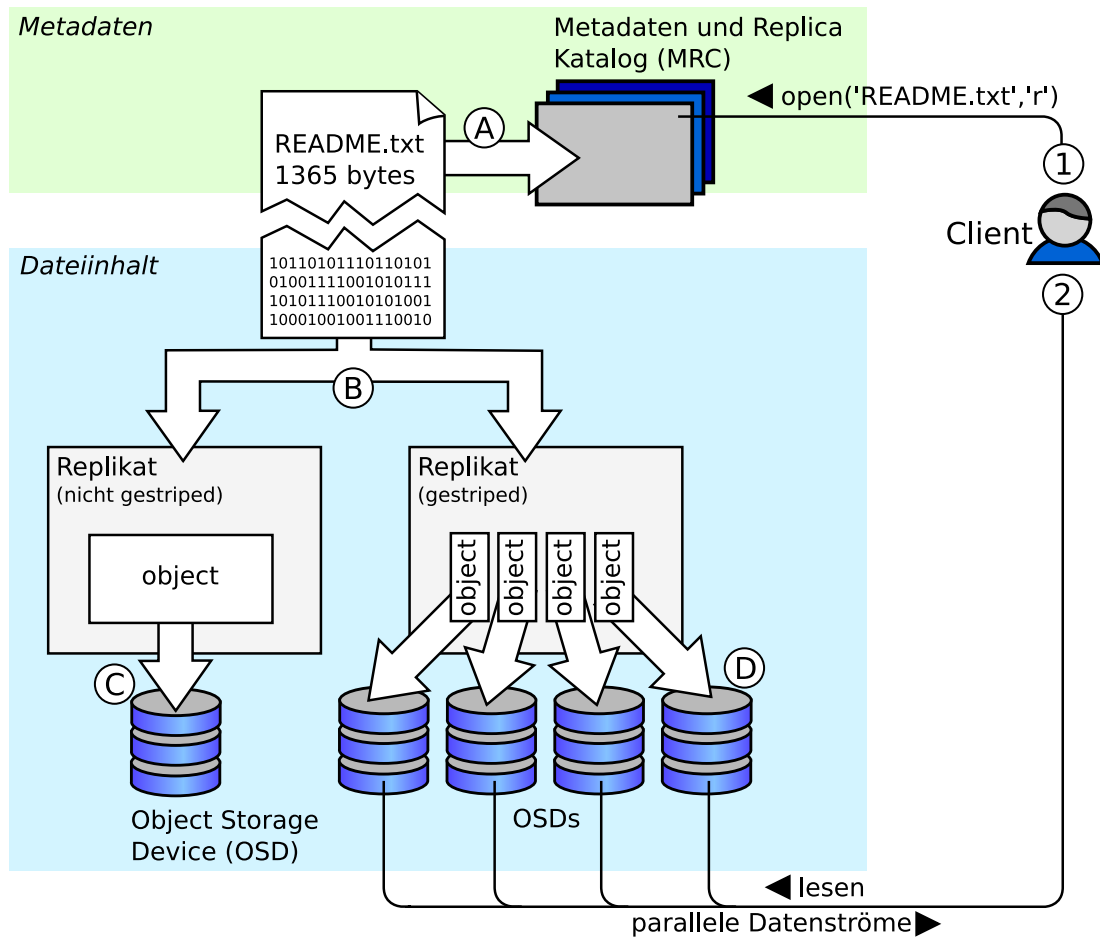


ABBILDUNG 2.54: Funktionsweise des verteilten Dateisystems *XtreemFS*.

Objektbasierte Dateisysteme sind zwar bereits kommerziell erhältlich und werden auch schon in großen Installationen eingesetzt, sie sind allerdings auf zentrale IT-Infrastrukturen ausgelegt und daher nicht für den Einsatz im Grid geeignet. Mit *XtreemFS* wird der objektbasierte Ansatz dahingehend erweitert, dass ein föderiertes globales Dateisystem aus Einzelinstallationen bei den einzelnen Teilnehmern entsteht. Lokale Installationen können dem System jederzeit beitreten

oder es verlassen. Einzelne Komponentenausfälle wirken sich nicht auf das Gesamtsystem aus.

Teil der Kernfunktionalität von XtreamFS ist die Replikation der Dateiinhalte. Dies dient zum einen der Dateiverfügbarkeit als auch der Erhöhung der Zugriffsgeschwindigkeit durch Lokalität. Die OSDs müssen gleichzeitige Schreibzugriffe koordinieren, um die Konsistenz der Replikate auf allen beteiligten OSDs zu garantieren. Je nach Zugriffsmuster wird hierfür jeder einzelne Zugriff koordiniert oder die Zuständigkeit für einzelne Abschnitte einer Datei unter den OSDs aufgeteilt. Es muss auch berücksichtigt werden, dass sich aktuelle Versionen der Daten bereits in Caches der Clients befinden können. Um unnötigen Aufwand zu vermeiden, können einzelne Replikate von der Koordinierung ausgeschlossen und später bei Bedarf aktualisiert werden. Zusätzlich soll das System in der Lage sein, regelmäßig wiederkehrende Zugriffsmuster der Applikationen zu klassifizieren und die Verteilung und Zugriffe der Dateien entsprechend zu optimieren.

Im letzten Jahr wurden der MRC und der OSD in unserer Arbeitsgruppe entwickelt. Hierbei wurde insbesondere ein effizientes Striping-Verfahren im OSD implementiert, das eine Erhöhung der Zugriffsbandbreite durch Hinzufügen von OSDs erlaubt (Abbildung 2.54). Um dies zu erreichen, musste ein Algorithmus entwickelt werden, der auf allen beteiligten OSDs eine konsistente Sicht auf die Dateigröße sicherstellt.

Die aktuelle Version von XtreamFS („Internal Release 2“) bietet bereits volle Dateisystem-Funktionalität und befindet sich in unserer Arbeitsgruppe im Produktiveinsatz. Durch automatische und umfangreiche nächtliche Tests mit bekannten Dateisystem-Testprogrammen wird eine gleichbleibende Code-Qualität auch während der laufenden Entwicklung gewährleistet.

Im letzten Jahr wurden auch Grundlagen für die Datenreplikation gelegt. Wir haben einen effizienten Algorithmus zur verteilten Lease-Aushandlung entwickelt und implementiert. Dieser bildet die Grundlage zur Sicherung der Datenkonsistenz. Im nächsten Jahr werden der OSD und MRC um weitere Teile zur Datenreplikation, wie z. B. Datenverteilung, Zugriffs-Muster-Erkennung oder Replikaverwaltung, ergänzt.

Um auch in sehr großen Grid-Systemen schnelle Antwortzeiten zu erzielen, werden in einem weiteren Arbeitspaket Infrastrukturdienste entwickelt, auf denen andere, höhere Dienste aufsetzen. Neben einem Verzeichnisdienst und Diensten für hochverfügbare Server entwickeln wir in XtreamOS ein Publish-/Subscribe-Protokoll, das unser weiter unten beschriebenes Overlay-Netzwerkprotokoll Chord[#] nutzt, um die erforderliche Skalierbarkeit und Fehlertoleranz zu garantieren.

Ein Prototyp des Publish-/Subscribe-Dienstes auf Chord[#] wurde in der Programmiersprache Erlang in Zusammenarbeit mit dem SELFMAN-Projekt implementiert. Für diesen Prototyp wurde in umfangreichen Simulationen auf PlanetLab die Skalierbarkeit und Nutzbarkeit im Internet demonstriert.

SELFMAN – Grundlagenforschung zu selbstregulierenden verteilten Systemen

Bearbeitet von: Thorsten Schütt, Monika Moser, Artur Andrzejak, Alexander Reinefeld, Nico Kruber, Christian v. Prollius

Kooperationspartner: Université Catholique de Louvain, Belgien; Royal Institute of Technology (KTH), Schweden; INRIA, Frankreich; France Telecom, Frankreich; National University of Singapore, Singapur

Förderung: Europäische Union

„SELFMAN“ steht für „Self Management for Large-Scale Distributed Systems based on Structured Overlay Networks and Components“. In diesem EU-Projekt betreiben wir Grundlagenforschung zur Selbstregulation von sehr großen verteilten Systemen. Modellhaft sollen Anwendungssysteme entwickelt werden, die in der Lage sind, ihre korrekte Funktionsweise autonom zu überwachen. Immer größer werdende firmenübergreifende oder gar weltumspannende Systeme sind derart komplex, dass sie nur noch mit Hilfe von Selbstregulierungsmechanismen zu handhaben oder warten sind. Ohne menschliche Intervention soll eine eigenständige Systemkonfiguration, Reparatur, Optimierung und Schutz möglich sein. Zu ihrer Realisierung werden strukturierte Overlay-Netzwerke eingesetzt, mit denen beliebig große Systeme aufgebaut und verwaltet werden können. Eine dynamische Konfiguration wird durch den Einsatz von Komponentenmodellen erleichtert.

In unserer Arbeitsgruppe entwickeln wir einen verteilten Speicherdienst mit replizierten Daten als ein konkretes Beispiel eines selbstregulierenden Systems. Dieser Speicherdienst soll Transaktionen und hohe Konsistenzgarantien unterstützen. Aufbauend auf unserem Chord[#]-Overlay-Netzwerk und dem in Stockholm entwickelten DKS-Overlay-Netzwerk entwerfen wir ein System, das Ausfälle einzelner Speicherknoten toleriert und dabei die Konsistenz der Daten sicherstellt.

Ein Teil unserer Arbeit befasst sich mit Protokollen zur Datenverwaltung, die Transaktionen unterstützen. Unsere gemeinsam mit dem SICS in Stockholm entwickelten Protokolle [11] basieren auf Quorum-Algorithmen und einem Atomic Commit Protokoll, das Paxos nutzt. Damit kann eine gewisse Anzahl von Knotenausfällen toleriert werden, ohne dass das System in seiner Funktionalität beeinträchtigt wird. Wir implementieren diese Protokolle in unserem Erlang basierten Chord[#]-Overlay-Netzwerk.

Die Selbstverwaltungsmechanismen der Strukturierten Overlay Netzwerke Chord[#] und DKS reparieren die Struktur des Netzwerks, sobald der Ausfall eines Knotens erkannt wird. Jedoch kann es in Weitverkehrsnetzen passieren, dass Knoten fälschlicherweise als ausgefallen betrachtet werden, wenn ihre Netzwerkverbindung zu anderen Knoten sehr langsam ist. Als Folge können sich verschiedene Speicherknoten für dieselben Daten verantwortlich fühlen und gleichzeitige Schreibzugriffe, die zu Konflikten führen, zulassen. Zusammen mit dem SICS analysieren wir die Häufigkeit des Auftretens solcher Inkonsistenzen und ihre

möglichen Auswirkungen auf die Konsistenz der gespeicherten Daten in unserem System.

Wir nutzen unsere Implementation des Speicherdienstes um ein verteiltes Wikipedia zu realisieren. Dieses dient als Beispielanwendung für SELFMAN, um die entwickelten Konzepte zu überprüfen.

CoreGrid-Forschungsnetzwerk

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Alexander Reinefeld, Thomas Röblitz, Florian Schintke, Thorsten Schütt, Mikael Höggvist, Thomas Steinke

Kooperationspartner: Forscher aus 40 europäischen Instituten

Förderung: Europäische Union

Das Projekt CoreGrid „European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large-Scale Distributed, Grid and Peer-to-Peer Technologies“ unterstützt die wissenschaftliche Zusammenarbeit von 40 europäischen Universitäten und Forschungsinstituten. Als so genanntes „Network of Excellence“ soll es die Qualität der Forschung im Grid- und Peer-to-Peer-Computing steigern und die Ergebnisse einer breiteren Öffentlichkeit verfügbar machen. Dies geschieht durch gemeinsame Forschungsaktivitäten, Symposien sowie gegenseitige Kurzbesuche und Stipendien für Postdoktoranden.

Unsere Arbeitsgruppe ist an den virtuellen Instituten „Architectural Issues: Scalability, Dependability, Adaptability“ (WP4, stellvertretende Leitung) und „Resource Management“ (WP6) beteiligt. In WP4 liegen die primären Forschungsthemen in der Untersuchung von Skalierbarkeit, Adaptivität und Fehlertoleranz von Grid-Architekturen, während das Hauptanliegen vom WP6 das Scheduling in verteilten Systemen ist. Im Jahr 2007 haben wir für WP4 an dem Institutstreffen in Heraklion teilgenommen und für WP6 an zwei Treffen in Manchester und Rennes. Weiterhin waren wir aktiv am „CoreGrid Workshop on Grid Programming Model, Grid and P2P Systems Architecture, Grid Systems, Tools and Environments“ beteiligt und haben Arbeiten zu dem „CoreGrid Integration Workshop 2008 – Integrated Research in Grid Computing“ eingereicht.

2007 erschien eine von uns editierte Sonderausgabe in der Zeitschrift „Future Generation of Computer Systems“, die ausgewählte Beiträge des *2nd CoreGrid Workshop on Grid and P2P Systems Architecture* (Januar 2006) enthält.

Unsere Kooperation im CoreGrid-Netzwerk mündete in vielerlei Publikationen über Peer-To-Peer-Systeme (z. B. [11]) und Selbstmanagement (z. B. [3, 4]). Weitere Aktivitäten umfassten die Vorbereitung eines Antrags für das 6. EU-Rahmenprogramm „ICT-2007.1.2: Service and Software Architectures, Infrastructures and Engineering“ gemeinsam mit zwei weiteren CoreGrid-Partnern sowie mehreren Industriepartnern.

C3-Grid – Collaborative Climate Community Data and Processing Grid

Bearbeitet von: Stefan Plantikow, Tobias Langhammer, Florian Schintke, Nico Kruber

Kooperationspartner: Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven; Universität Dortmund; Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg; Universität zu Köln; Deutscher Wetterdienst; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt; Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im C3-Grid-Projekt wird eine grid-basierte Umgebung für die deutsche Erdsystemforschung geschaffen, die die effiziente verteilte Datenverarbeitung und den interinstitutionellen Austausch hochvolumiger Modell- und Beobachtungsdaten erlaubt. Das kollaborative Gesamtsystem soll einen einheitlichen und transparenten Zugriff auf geographisch und institutionell verteilte Archive bieten und die Verarbeitung großer Datenmengen erleichtern.

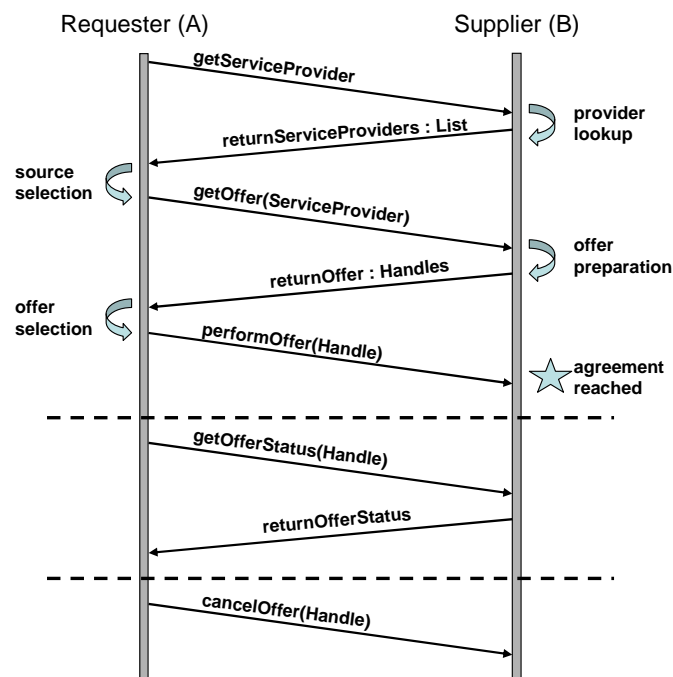


ABBILDUNG 2.55: Generalisiertes Verhandlungsprotokoll zwischen Scheduler und Datenmanagement im C3-Grid.

Für klimawissenschaftliche Analysen ist es häufig notwendig, hochvolumige Klimadaten zunächst an entfernten Standorten zu reduzieren, um sie dann zur Weiterverarbeitung an andere Standorte verschicken zu können. Der im ZIB entworfene Datenmanagementdienst enthält daher – im Gegensatz zu anderen Systemen –

Komponenten zur eigenständigen, optimierten Planung zukünftiger Datentransfers. In Kooperation mit dem Scheduler (Abbildung 2.55) dienen solche geplanten Datentransfers der effizienteren Nutzung der zur Verfügung stehenden Ressourcen. In die Planung gehen Informationen über die Verfügbarkeit von Ressourcen und replizierten Daten ein, um die Transferzeiten und Volumina zu minimieren [8]. Unsere Datenmanagementlösung wurde weiter flexibilisiert, stabilisiert und für die nächste Generation der C3-Grid-Software vorbereitet. Hierfür waren Anpassungen an den neuen Scheduler sowie die Integration und Implementation von Transaktionen für die lokale Verwaltung der Daten und Metadaten notwendig.

Eine weitere Besonderheit im C3-Grid-Projekt ist die umfassende Verwendung und Generierung von Datenbeschreibungen nach dem ISO 19115-Standard, die eine wissenschaftliche Verwertung erst ermöglicht. Die in der Arbeitsgruppe installierten und entwickelten Informationsdienste bieten eine effiziente Suche im Volltext und nach geographisch-zeitlicher Relevanz. Sie ermöglichen Klimaforschern den Zugriff sowohl auf Daten in Archiven als auch auf Zwischenprodukte von Grid-Anwendungen.

MediGrid – Ressourcenfusion für Medizin und Lebenswissenschaften

Bearbeitet von: Kathrin Peter, Thomas Steinke, Daniel Mauter, Michael Peick
Kooperationspartner: Universität Göttingen; Charité Universitätsmedizin Berlin; Fraunhofer-Gesellschaft; Universitätsklinikum Schleswig-Holstein; Universität Marburg; Universität Leipzig

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das MediGrid-Projekt dient dem Aufbau einer produktiven Grid-Umgebung für biomedizinische Anwendungen, die ein ausgesprochen heterogenes Anforderungsprofil aufweisen. Die Nutzung von Grid-Technologien im biomedizinischen Bereich wird stellvertretend durch Anwendungen der Bioinformatik, der medizinischen Bildverarbeitung und der klinischen Forschung demonstriert. Basierend auf existierenden Grid-Middleware-Lösungen wie Globus, SRB und GridSphere werden MediGrid-spezifische Dienste angepasst. Sie bieten dem MediGrid-Anwender eine Arbeitsplattform zur Ausführung von Jobs und der Speicherung von Daten in einer Grid-Umgebung, die leistungsfähige Ressourcen an vielen Standorten in Deutschland umfasst. Eines der wesentlichen Ziele in MediGrid ist es, Grid-Ressourcen und Dienste komfortabel dem biomedizinischen Endanwender zur Verfügung zu stellen, ohne dass dieser – im Vergleich zu anderen Grid-Communities – tiefgreifende technische Kenntnisse über Gridtechnologien haben muss [10].

Unsere Arbeitsgruppe arbeitet federführend im „Modul Ressourcenfusion“. Im Berichtszeitraum wurden die aus Mitteln der BMBF-Sonderinvestition 2006 beschafften Systeme in Göttingen, Dresden und Berlin für MediGrid und ande-

re D-Grid-Communities in Betrieb genommen. Dazu wurden neben den durch die D-Grid-Referenzinstallation vorgegebenen Middleware-Komponenten weitere MediGrid-spezifische Dienste installiert. Der zuverlässige Betrieb wird mit Hilfe des Monitoringtools Nagios sichergestellt. Das bislang prototypisch betriebene Datenmanagementsystem SRB (Storage Resource Broker) wurde auf den neuen Systemen für den Produktivbetrieb installiert und erlaubt einen transparenten Zugriff auf physikalische Speicherressourcen in Berlin, Dresden und Göttingen. Den Anwendern stehen damit eine Vielzahl von Schnittstellen zum SRB zur Verfügung. Im MediGrid-Portal können Anwender mit Hilfe des Datenmanagementportlets (Abbildung 2.56) auf ihre Daten mittels SRB transparent zugreifen, ohne den physikalischen Speicherort ihrer Daten kennen zu müssen. Das SRB-Portlet wurde initial vom BIRN-Projekt (<http://www.nbirn.net/index.shtm>) entwickelt und zur Verwendung in MediGrid entsprechend angepasst. Es ermöglicht einen rein web-basierten Zugang ohne Client-Installation und ohne spezifische Firewall-Konfiguration beim Benutzer, was eine entscheidende Bedingung für die Verwendung im klinischen Bereich ist. Wichtige Funktionalitäten sind der zertifikatsbasierte Zugang (X.509), ein Zugriffsrechtmanagement für Benutzer und Gruppen, ein transparenter Datenzugriff auf verteilte Daten und Metadaten-speicherung sowie Metadaten-basierte Suche nach Daten.

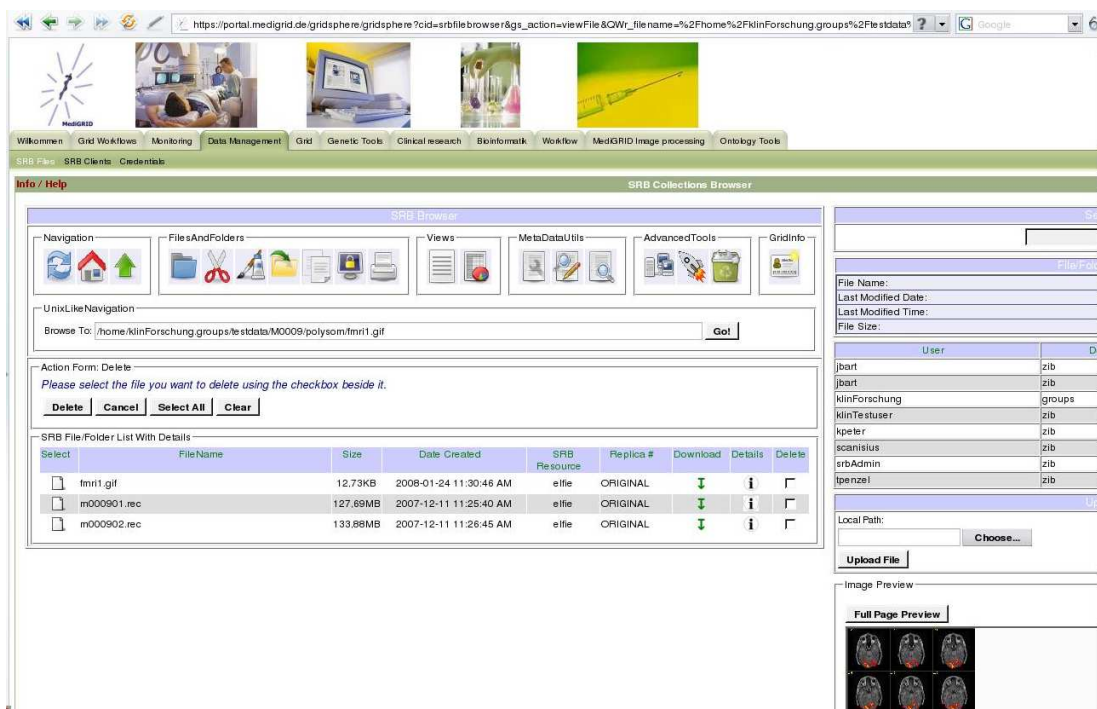


ABBILDUNG 2.56: Datenmanagementportlet zum SRB Zugriff im MediGrid Portal

Weiterhin evaluieren wir das SRB-Nachfolgesystem *iRODS* (integrated Rule-Oriented Data System). Dieses flexible, regelbasierte System ist im Gegensatz zum SRB einfacher um neue Funktionalitäten erweiterbar bzw. an spezielle Anforderungen der Communities anpassbar. Hier arbeiten wir u. a. an der fehlertoleranten, verteilten und performanten Datenspeicherung durch Einsatz von ausfalltoleranten Codes, um auch bei Nichtverfügbarkeit einiger Speicher den Datenzugriff zuzusichern [20].

AstroGrid-D – German Astronomy Community Grid

Bearbeitet von: Mikael Höggqvist, Thomas Röblitz

Kooperationspartner: Astrophysikalisches Institut Potsdam; MPI für Gravitationsphysik, Golm; MPI für Astrophysik, Garching; MPI für Extraterrestrische Physik, Garching; TU München; Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das Projekt AstroGrid-D [6] ist ein Forschungsprojekt zur Unterstützung des verteilten wissenschaftlichen Arbeitens im D-Grid-Verbund. Ziel dieses Vorhabens ist die Schaffung einer grid-basierten Infrastruktur für die deutsche astronomische und astrophysikalische Forschung, aufbauend auf dem Rechnerverbund der teilnehmenden Institute und Rechenzentren, um die existierenden Hardwareressourcen effektiver nutzen zu können.

Unsere Arbeitsgruppe ist an der Entwicklung der Kernkomponenten beteiligt: Verwaltung verteilter Dateien, Informationsdienst sowie Scheduling paralleler Simulationen. Der von uns entwickelte Informationsdienst „Stellaris“ [9] dient der Speicherung und dem Wiederauffinden von Metadaten mit Hilfe einer flexiblen Anfragesprache. Die Architektur der verteilten Dateiverwaltung benutzt einen einheitlichen Namensraum für Dateien und erlaubt die Erstellung von Replikaten. In der ersten Version stellen Werkzeuge des Globus Toolkits, wie z. B. der Replica Location Service (RLS) und GridFTP, diese Funktionalität bereit.

Für das Scheduling paralleler Simulationen haben wir die Verfahren für die Platzierung von Reservierungen verbessert, so dass weniger Informationen zwischen lokalen Ressourcen-Management-Systemen und dem Grid-Scheduler ausgetauscht werden müssen. Fehlende Informationen werden interpoliert. Das Scheduling paralleler Simulationen erfordert die Kombination mehrerer Reservierungen. Im Berichtszeitraum haben wir die Modellierung der Auswahl der besten Kombination als Mixed-Integer-Linear-Optimierungsproblem weiterentwickelt und umfangreiche Untersuchungen der Skalierbarkeit durchgeführt. Dabei hat sich gezeigt, dass der gewählte Ansatz nur für kleine Anwendungsszenarien durchführbar ist. Bei größeren Szenarien, d. h. bei Verwendung von mehreren Ressourcen oder auch bei der Erweiterung des Anwendungsszenarios zu Workflows müssen Heuristiken eingesetzt werden.

Für die Integration von robotischen Teleskopen haben wir eine Systemarchitektur auf Basis des Globus Toolkit entwickelt [7]. Während die Durchführung von Beobachtungen Gemeinsamkeiten mit der Durchführung von Rechenjobs aufweist – eine Beobachtung hat Eingabeparameter und erzeugt Bilder – erfordert die Verteilung von Beobachtungen zu robotischen Teleskopen einen aufwändigeren Mechanismus. Im Berichtszeitraum haben wir einen ersten Ansatz für einen solchen Mechanismus entwickelt.

In AstroGrid-D unterscheiden wir vier verschiedene Metadattentypen: (1) Informationen über Ressourcen, (2) den Zustand von Aktivitäten, (3) anwendungsspezifische Metadaten sowie (4) forschungsspezifische Metadaten. Der Informationsdienst ist so konstruiert, dass er alle Typen in einer Instanz speichern kann und typunabhängige Abfragen ermöglicht. Um die verschiedenen Typen mit einer einheitlichen Methode repräsentieren zu können, wird das „Resource Description Framework“ RDF benutzt. RDF-Metadaten werden durch SPARQL abgefragt. Sowohl RDF als auch SPARQL sind Empfehlungen für zukünftige Standards des World Wide Web Consortium (W3C). Im Berichtszeitraum haben wir die Performance durch die Integration von zwei neuen Indexierungsbibliotheken verbessert. Darüberhinaus werden Abfragen über verteilte Datensätze durch die Föderation von mehreren Dienstinstanzen ermöglicht. Die Zuverlässigkeit der gespeicherten Daten wurde durch eine Trennung der Indizes und der Metadaten selbst erhöht.

HEPCG – Entwicklung von Anwendungen und Komponenten zur Datenauswertung in der Hochenergiephysik in einer nationalen e-Science-Umgebung

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: DESY Hamburg und Zeuthen; GSI Darmstadt; LMU München; Universität Dortmund; TU Dresden; Universität Freiburg; Universität Siegen; Universität Wuppertal

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im Jahr 2007 wurde das im Rahmen des D-Grids aufgebaute HEP Community Grid im Bereich der Hochenergiephysik zusammen mit dem DESY Hamburg, dem NIC/DESY Zeuthen und dem Forschungszentrum Jülich weiter ausgebaut.

Die Sichtbarkeit des Speicherangebots des ZIB, die technisch früher über das DESY Hamburg erfolgte, wird nun durch einen ZIB-eigenen Grid-Informationsdienst (sBDII) gewährleistet, wodurch das ZIB als selbständiger Informationsdienstleister in diesem Grid auftritt. Weiterhin wurden für die Community die Kommandos zur Administration und zum Datentransfer erweitert (hier ist insbesondere die Checksummenprüfung beim Datentransfer zu nennen) und ein Tool zur komfortablen Replikation von Daten innerhalb dieses Grids entwickelt.

DGI – D-Grid-Integrationsprojekt

Bearbeitet von: Florian Schintke, Daniel Mauter, Kathrin Peter

Kooperationspartner: DFN-Verein e. V., Berlin; Forschungszentrum Karlsruhe; Forschungszentrum Jülich; Forschungszentrum L3S, Hannover; Regionales Rechenzentrum Niedersachsen, Hannover; Fraunhofer-Institut SCAI, Sankt Augustin; Fraunhofer-Institut SIT, Darmstadt; Paderborn Center for Parallel Computing, Paderborn

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das D-Grid-Integrationsprojekt stellt die robuste, flexible und nachhaltig nutzbare Basisinfrastruktur für die Communityprojekte des D-Grid-Verbundes bereit. Mit ihr wird die transparente gemeinschaftliche Nutzung der verteilten Ressourcen ermöglicht, die zur Realisierung einer aktiven *e-Science* in Deutschland notwendig ist.

Unser Augenmerk richten wir dabei insbesondere auf die Aspekte des verteilten Daten- und Metadatenmanagements. Die Anforderungen der Communities sind gerade in diesem Themenumfeld sehr unterschiedlich und gemeinsame Lösungen sind nur schwer zu realisieren. Ein auch in internationalen Grid-Projekten verbreitetes Werkzeug für die Verwaltung verteilter Daten und Metadaten stellt der Storage Resource Broker (SRB) des San Diego Supercomputer Centers dar, dessen Leistungsfähigkeit und Eignung wir untersucht und mit seiner kommerziell verfügbaren Variante verglichen haben. Unsere Referenzinstallation des SRB wird den D-Grid-Nutzern zur Verfügung gestellt und von uns gepflegt.

Auf neue und bisher nicht bedachte Nutzungsanforderungen kann mit der Datenmanagementlösung SRB nicht adäquat reagiert werden. Mit „i Rule Oriented Data System“ (iRODS) entsteht derzeit ein interessantes Nachfolgesystem des SRB, das flexibel über Regeln konfiguriert und gesteuert werden kann. Es ist sowohl inhaltlich als auch aus entwicklungs- und lizenzpolitischer Sicht interessant, da sich jeder bei der Entwicklung beteiligen kann und es auch für kommerzielle Zwecke kostenlos nutzbar ist. Wir sammeln erste Erfahrungen mit dem System und entwickeln Erweiterungen wie eine von den Regeln gesteuerte automatisierte Metadatenextraktion, was sowohl die Konsistenz der Metadaten, als auch den Umstieg auf das neue System verbessert.

D-Grid-Kernknoten

Bearbeitet von: Matthias Beick, Mikael Höggqvist, Björn Kolbeck, Daniel Mauter, Kathrin Peter, Thomas Röblitz, Florian Schintke

Kooperationspartner: D-Grid

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Seit Ende 2006 betreibt das ZIB einen Cluster für die D-Grid Community, der 160 Rechenknoten und knapp 100 TByte Festplattenspeicher umfasst. Durch weitere eingeworbene investive Mittel zum Ende des Jahres 2007 konnte das System um

320 Rechenknoten, 250 TByte Festplattenspeicher und eine Archivkomponente zur Datensicherung auf Bändern (Abbildung 2.57) erweitert werden.



ABBILDUNG 2.57: D-Grid-Archivsystem.

In Kooperation mit anderen Standorten in Deutschland steht der Cluster als verteilte Ressource den D-Grid-Anwendungen zur Verfügung. Mit diesen Ressourcen wird erstmals in Deutschland eine einheitliche, gemeinsam nutzbare Rechenumgebung über sehr viele Standorte hinweg realisiert, die auch wir für unsere Simulationen und Praxistests nutzen.

Das Grundsystem des Clusters wird von der Abteilung High Performance Computing des ZIB betrieben (s. Kapitel 4.1.5) – die notwendige Grid-Middleware, wie zum Beispiel Globus, gLite und Unicore, von der Abteilung Computer Science Research.

Co-Reservierung von Ressourcen im Grid

Bearbeitet von: Thomas Röblitz, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: ID IMAG Grenoble, TU Berlin

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung, AstroGrid-D

Viele Anwendungen in Wissenschaft und Wirtschaft erfordern die Einhaltung von Dienstgütekriterien, die vorab zwischen den Dienstbringern und Nutzern vereinbart werden. Da Anwendungen heutzutage oft mehrere geographisch verteilte

Ressourcen nutzen, ist eine koordinierte Zuweisung der einzelnen Arbeitsschritte (Tasks/Jobs) zu Ressourcen notwendig. In diesem Projekt werden Verfahren für die Modellierung und Koordination solcher Zuweisungen auf der Basis von Vorausreservierungen entwickelt.

Der grundlegende Ansatz dieser Verfahren liegt darin, das Zuweisungsproblem auf ein Optimierungsproblem abzubilden. Je Anwendungsteil i wird das Problem mit vier Variablen R_i , T_i , D_i und Q_i modelliert, wobei R_i für die zugewiesene Ressource, T_i für den Startzeitpunkt der Zuweisung, D_i für die Dauer der Zuweisung und Q_i für die Dienstgüte (englisch: quality of service) stehen. Mit Hilfe von Nebenbedingungen können sowohl die Nutzeranforderungen als auch die der Ressourcen-Provider modelliert werden. Sollte es mehrere Zuweisungen geben, die alle Nebenbedingungen erfüllen, wird die gemäß einer Zielfunktion beste gewählt.

Protokolle und Algorithmen für strukturierte Overlay-Netzwerke

Bearbeitet von: Thorsten Schütt, Florian Schintke, Alexander Reinefeld, Christian von Prollius, Roland Tuschl

Kooperationspartner: SICS, Stockholm, Schweden

Strukturierte Overlay-Netzwerke haben sich in letzter Zeit zur wichtigen Grundlage für skalierbare verteilte Systeme entwickelt. Neben ihrer guten Skalierbarkeit zeichnen sie sich vor allem durch ihre Selbstorganisationseigenschaften aus. Chord war eines der ersten Systeme in diesem Bereich, das eine verteilte Hash-Tabelle nutzt, um die Dateneinträge über alle verfügbaren Knoten möglichst gleichmäßig zu verteilen. Die Verwendung der Hash-Tabelle erlaubt allerdings nur einfache Suchanfragen ohne Bereichsangabe, was für viele Anwendungen nicht ausreichend ist.

In diesem Projekt analysieren und entwickeln wir Methoden, die komplexe Suchanfragen unterstützen und zugleich die Daten gegen den Ausfall einzelner Rechner schützen. Auf der Grundlage von Chord haben wir das System Chord[#] entwickelt. Es garantiert einen logarithmischen Routing-Aufwand bei der Bearbeitung von Suchanfragen, während Chord den logarithmischen Aufwand nur mit „hoher Wahrscheinlichkeit“ garantiert. In unseren Simulationen konnten wir zeigen, dass Chord[#] in manchen Fällen bis zu viermal schneller als Chord ist. Zusätzlich benötigt Chord[#] im Durchschnitt weniger Kommunikationsbandbreite zur Aufrechterhaltung der Systemintegrität. Auch in der Expressivität der Suchanfragen ist Chord[#] überlegen: Es unterstützt Bereichsabfragen, in denen Namen gefragt sind, die zwischen einer unteren und einer oberen Schranke liegen. Chord kann aufgrund des Hashings derartige Anfragen nicht bearbeiten.

Abbildung 2.58 zeigt zwei der vier Transformationsschritte, die notwendig sind, um Chord[#] aus Chord abzuleiten. Wenn der originale Chord-Algorithmus ohne Hashing betrieben wird (Abbildung 2.58b), sind zwar Bereichsabfragen möglich, es kann aber zur Überlastung einzelner Knoten kommen, was die Suchleistung

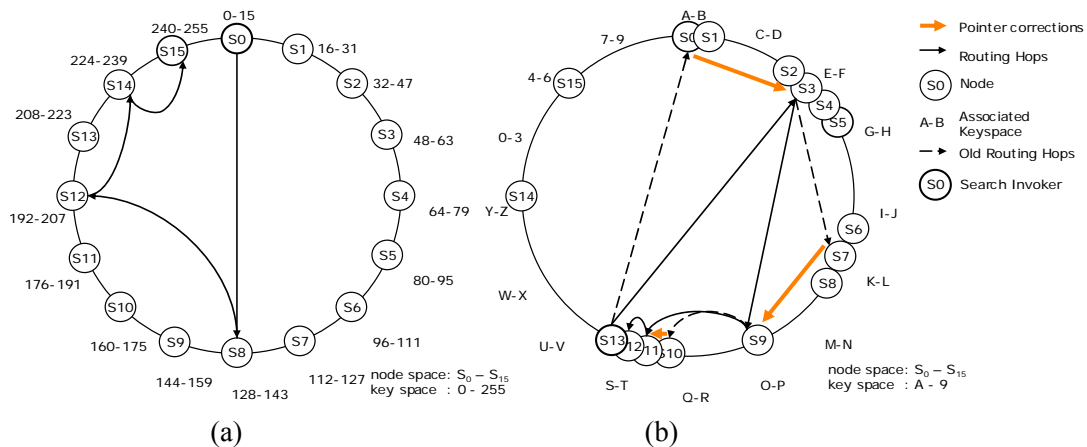


ABBILDUNG 2.58: Transformationsschritte von Chord nach Chord[#].

drastisch reduziert. Wird nun ein expliziter Lastausgleich eingeführt, sind die Knoten zwar nicht mehr überlastet, aber der Aufwand für Suchanfragen ist nicht mehr logarithmisch ($O(\log N)$). Deshalb verwenden wir in Chord[#] angepasste Routingtabellen, die eine Suche mit logarithmischem Aufwand garantieren.

Wir haben Chord[#] um die Unterstützung *mehrdimensionaler* Daten erweitert, wobei der Aufwand für Suchanfragen weiterhin logarithmisch bleibt. Insbesondere unterstützt Chord[#] nun beliebig geformte Bereichsabfragen, wie beispielsweise: „Zeige die Standorte aller Hotels, die östlich der Koordinaten 52°30'59" N, 13°22'40" O in einem Umkreis von 500 Metern liegen“. Chord[#] bietet somit eine optimale Grundlage zur Entwicklung effizienter geographischer Informationssysteme oder für Anwendungen in der Computergraphik.

Im Rahmen der EU Projekte SELFMAN und XtremOS untersuchen wir verschiedene Konsistenzmodelle für den Zugriff und das Speichern von Daten. Weiterhin werden Anwendungen wie z. B. ein Publish-Subscribe-System und ein Locking-Dienst entwickelt, die Chord[#] als Datenbank nutzen.

Das verteilte ZIB-DMS-Datenmanagementsystem

Bearbeitet von: Florian Schintke, Tinosch Kolagheichi-Ganjineh, Monika Moser, Christian von Prollius, Alexander Reinefeld, Thorsten Schütt, Roland Tuschl

Mit der stetig wachsenden Speicherkapazität von Festplatten wird das flexible Management von Daten zunehmend an Bedeutung gewinnen, um den Überblick über die Daten zu behalten und sie weiterhin effizient nutzen zu können. Im Zuge von immer schnelleren Netzwerken und fortschreitender Globalisierung steigt der Bedarf für ein verteiltes selbstorganisierendes Datenmanagementsystem, das Anwendern eine globale Sicht auf ihre verteilten Daten ermöglicht und transparent

Datentransfers, Management von Replikaten und Datenorganisation unterstützt. Unser Forschungsprototyp ZIB-DMS („ZIB Distributed Data Management System“) realisiert ein solches System, an dem wir neue Lösungsmöglichkeiten in diesem Bereich untersuchen. Insbesondere die flexible, nutzergesteuerte Erfassung und Handhabung von Metadaten und deren verteilte Speicherung mit Hilfe eines P2P-Ansatzes hat sich als große Herausforderung erwiesen. Unser SONAR-Algorithmus [18, 15, 16, 14, 17] bietet hierfür eine exzellente Grundlage, da er erstmals gleichzeitig die effiziente direkte Abbildung eines mehrdimensionalen Datenraumes auf verteilte Knoten und effiziente Bereichsabfragen in diesem Datenraum ermöglicht.

Durch unsere Forschungsaktivitäten rund um das ZIB-DMS sind weitere Forschungsthemen wie Transaktionen in Peer-to-Peer Systemen [12, 13] und Grid-Dateisystemen angestoßen worden, deren Ergebnisse nutzbringend in ZIB-DMS eingesetzt werden können, nun aber primär in eigenen Projekten (SELFMAN, XtreamOS) weiter verfolgt werden.

Modellierung und Vorhersage von Systemcharakteristiken zur automatischen Regulierung von Zuverlässigkeit und Performance

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Monika Moser, Mehmet Ceyran

Kooperationspartner: UPC Barcelona, Spanien; University of Coimbra, Portugal

Die Modellierung und Vorhersage von Systemen und Anwendungen ist ein wichtiges Werkzeug für die Selbstregulierung von Computersystemen, bekannt auch unter dem Namen *Self-Management* oder *Autonomic Computing* [2]. Zu den Beispielen der modellierten Charakteristika gehören: Verlauf der Leistung einer Anwendung, Verlauf der Latenzzeiten bei Serveranfragen, Auslastung des physikalischen Speichers einer Maschine oder eines Clusters, oder die Verfügbarkeit der einzelnen Knoten eines Desktop-Pools über die Zeit. Die gewonnenen Modelle und Vorhersagen können unter anderem in folgenden Selbstregulierungsvorgängen verwendet werden:

- Maximierung der Zuverlässigkeit und Performance von Applikationen, die der sog. *Softwarealterung* unterliegen [4, 3],
- Erhöhung der Zuverlässigkeit eines komplexen verteilten Systems durch proaktive Migration und Aufstockung der Ressourcen im Falle einer prognostizierten Fehlfunktion oder Teilausfalls [1, 19],
- Erkennung von Systeminfektionen (intrusion detection) oder Teilausfällen durch den Vergleich von aufgestellten Modellen mit dem aktuellen Verhalten,
- Zuordnung (Scheduling) von Jobs und Daten an die Knoten eines volatilen Clusters (z. B. Desktop-Pools) um die Anzahl der Job-Migrationen und

abgebrochener Jobs zu minimieren (hier wird die Verfügbarkeit einzelner Knoten über die Zeit modelliert).

Wie auch im vorigen Jahr dominierten die ersten drei der oben genannten Themen diesen Forschungsbereich. Dabei spielte die Modellierung und Beseitigung des Phänomens der Softwarealterung (software aging) die primäre Rolle. Bei diesem Effekt führt eine Akkumulierung von Zustandsfehlern (Rundungsfehlern, Speicherverlusten und anderen) zu einer Verminderung der Anwendungsleistung oder zu einem vollständigen Versagen der Anwendung. Dieses Verhalten ist häufig bei Programmen wie Web Servern oder Web Service Servern zu beobachten, da diese über längere Zeiträume laufen. Dabei ist die Softwarealterung in diesen Bereichen besonders kritisch, weil eine zunehmende Zahl von Unternehmen dienstbasierte Architekturen (SOA) als Rückgrat ihrer IT-Infrastrukturen einsetzt.

Die im Jahr 2006 angefangene Arbeit an den deterministischen Modellen der Alterung wurde fortgesetzt. Neben der Veröffentlichung in der renommierten Konferenz „Integrated Management“ [4] diente diese Arbeit auch als Basis für eine neue Methode der Verjüngung der Anwendungen (software rejuvenation). Im Normalfall wird bei dieser Maßnahme gegen Softwarealterung ein regelmäßiger Neustart (Rejuvenation) der Anwendungen durchgeführt. Dabei wird die Verfügbarkeit der Anwendung unterbrochen. Mit unserem neuen Ansatz kann dagegen pausenlose Verfügbarkeit gewährleistet werden. Dabei werden mehrere Replika der alternden Anwendung zugleich betrieben, und nur eine von ihnen auf einmal neu gestartet. Die oben erwähnten deterministischen Modelle erlauben es, die Zeiten der Neustarts so zu wählen, dass die durchschnittliche Gesamtleistung oder die garantierte Gesamtleistung optimiert werden [3]. Abbildung 2.59 veranschaulicht, wie drei Replika synchronisiert gestartet werden, damit die kumulative Leistung (Durchsatz der Anfragen) gemäß obiger Modi maximiert werden kann.

Im Zusammenhang mit diesem Thema wurden auch Ansätze erforscht, die die Verfügbarkeit einer alternden oder (auch teilweise) ausgefallenen Anwendung mit Hilfe der *Virtualisierung* garantieren [1, 19]. Auch hier sind wir davon ausgegangen, dass man die Anwendung replizieren kann. Dabei werden jedoch sog. Virtual Machine Monitors (VMMs) als Container für die Replika verwendet. Dadurch entfällt die Notwendigkeit zusätzlicher Hardware, wobei zugleich die Managementkosten des Systems reduziert werden. Es hat sich gezeigt, dass die Virtualisierung nur mäßige Reduktion der Leistung (im Bereich von 12%) als einen unerwünschten Nebeneffekt hat. Im Gegensatz zu dem oben besprochenen Artikel [3] sind wir bei den Arbeiten [1, 19] von der Annahme ausgegangen, dass nur ein Replikat auf einmal aktiv ist, und ein zweites sich im Bereitschaftsmodus befindet. Während dies den Aufbau einer solchen Lösung vereinfacht, wird zugleich die Möglichkeit von Leistungsoptimierung verhindert. In Zukunft werden wir uns deshalb der Kombination beider Ansätze widmen.

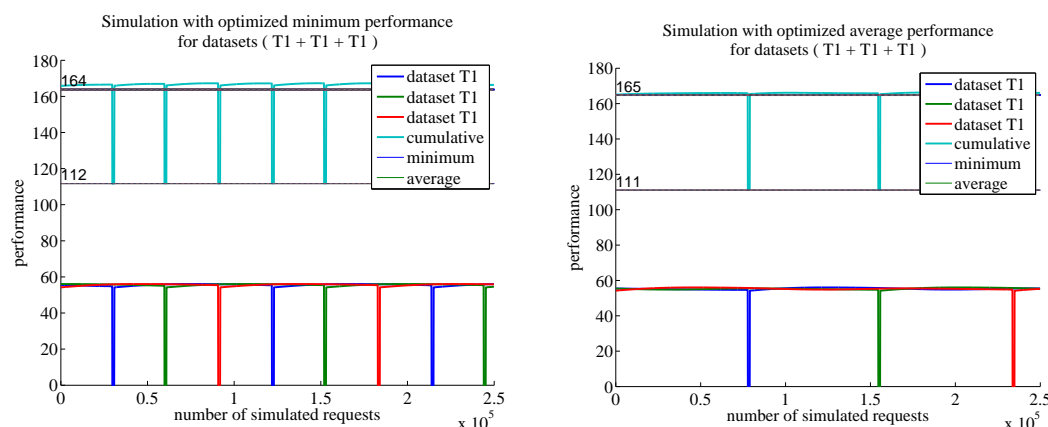


ABBILDUNG 2.59: Simulierter Leistungsverlauf von individuellen Anwendungen des Typs T1 (unterer Teil) und die kumulative Leistung (oberer Teil). Links: optimiert für die höchste garantierte Gesamtleistung, rechts: optimiert für die höchste durchschnittliche Gesamtleistung.

GridChem – Grid Computing in Chemistry

Bearbeitet von: Thomas Steinke, Michael Peick

Kooperationspartner: ETH Zürich, Schweiz; University of Cambridge, Imperial College London, Vereinigtes Königreich; Universität Kopenhagen, Schweden; FAU Erlangen-Nürnberg; Universidad de Sevilla, Spanien

Förderung: Europäische Union

Die *COST Action GridChem* fördert die Etablierung europäischer virtueller Organisationen, um molekulare Simulationen in Grids zu ermöglichen. Damit soll das Potential von Grid-Technologien für quantenchemische Berechnungen von Moleküleigenschaften oder molekulardynamische Simulationen auf unterschiedlichem theoretischem Niveau weiter ausgebaut werden. Durch die abgestimmten Entwicklungsarbeiten in dieser COST-Action sollen umfassende Rechenkampagnen in kürzerer Zeit und bei geringeren Kosten durchgeführt werden können. Hierfür muss die gesteigerte Komplexität der gewünschten Simulations-Workflows in den Bereichen Quantenchemie, Moleküldynamik und statistische Mechanik in Betracht gezogen werden. Insbesondere sollen auch verteilte Arbeitsabläufe unterstützt werden.

Wir leiten die Arbeitsgruppe „Computational Chemistry Workflows and Data Management“, in der wir Technologien für mehrere Demonstratoranwendungen weiterentwickeln, so dass wissenschaftlich validierte Hochdurchsatz-Workflows automatisch ablaufen können. Dazu müssen die chemischen Informationen für den Datenaustausch zwischen Prozessschritten in einem Standardformat (CML) repräsentiert werden (Schaffung von Interoperabilität). Die Rohdaten der Simula-

tionen sollen in geeigneten Archiven gespeichert werden, um anschließend mit diesen berechneten physikochemischen Moleküldaten weitgefächerte statistische Analysen betreiben zu können. Ein Workflow-Managementsystem soll einen weitestgehend automatisierten Ablauf des Anwendungsszenarios ermöglichen.

I3HP – Hadron Physics

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben, Stefan Wollny

Kooperationspartner: 48 europäische Institute, Koordination: Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Frascati, Italien

Förderung: Europäische Union

Im Rahmen der *Integrated Infrastructures Initiative Hadron Physics (I3HP)*, in der über 2000 europäische Wissenschaftler im Bereich der stark wechselwirkenden Materie forschen, stellt das ZIB Massenspeicherkapazität zur Verfügung, auf die über Grid-Technologien von ganz Europa zugegriffen werden kann. So werden wertvolle Zwischenergebnisse aufwendiger Simulationen zur weiteren Analyse für jeden berechtigten Wissenschaftler mit einem einfachen Linux-PC und Internet-Anschluss verfügbar. Im Rahmen des Projekts wurden bis Ende 2007 24 TByte Daten am ZIB gespeichert.

Neben der Basissoftware *dCache*¹ ermöglichen die am ZIB entwickelten Benutzerkommandos, die sog. *ltools*², einen einfachen Zugriff auf die Daten, ohne dass sich der Benutzer mit der unterliegenden Grid-Technologie vertraut machen muss.

Publikationen

- [1] J. Alonso, L. M. Silva, A. Andrzejak und J. Torres, *High-available Grid services through the use of virtualized clustering*, IEEE-GRID, September 2007.
- [2] A. Andrzejak und A. Reinefeld (eds.), *Paradigms for scalable and dependable Grids*, Future Generation Computer Systems (FCGS) **23** (2007).
- [3] A. Andrzejak, M. Moser und L. Silva, *Managing performance of aging applications via synchronized replica rejuvenation*, 18th IFIP/IEEE Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2007), October 2007.
- [4] A. Andrzejak und L. Silva, *Deterministic models of software aging and optimal rejuvenation schedules*, 10th IFIP/IEEE Symposium on Integrated Management (IM 2007), Mai 2007.
- [5] A. Clemm, L. Z. Granville und R. Stadler (Hg.), *Managing virtualization of networks and services, 18th ifip/ieee international workshop on distributed*

¹<http://www.dcache.org>

²<http://www.zib.de/i3hp/ltools>

- systems: Operations and management, dsom 2007, san josé, ca, usa, october 29-31, 2007, proceedings*, LNCS, Bd. 4785, Springer, 2007.
- [6] H. Enke, M. Steinmetz, T. Radke, A. Reiser, T. Röblitz und M. Höggqvist, *AstroGrid-D: Enhancing astronomic science with Grid technology*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, 2007.
 - [7] T. Granzer, F. Breitling, M. Braun, H. Enke und T. Röblitz, *Providing remote access to robotic telescopes by adopting Grid technology*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, 2007.
 - [8] C. Grimme, T. Langhammer, A. Papaspyrou und F. Schintke, *Negotiation-based choreography of data-intensive applications in the C3Grid project*.
 - [9] M. Höggqvist, T. Röblitz und A. Reinefeld, *Stellaris: An RDF-based information service for AstroGrid-D*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, Mai 2007.
 - [10] S. Kottha, K. Peter, T. Steinke, J. Bart, J. Falkner, A. Weisbecker, F. Viezens, Y. Mohammed, U. Sax, A. Hoheisel, T. Ernst, D. Sommerfeld, D. Krefting und M. Vossberg, *Medical image processing in MediGRID*, (2007).
 - [11] M. Moser und S. Haridi, *Atomic commitment in transactional DHTs*, Proceedings of the CoreGRID Symposium, 2007.
 - [12] S. Plantikow, A. Reinefeld und F. Schintke, *Distributed Wikis on structured overlays*, CoreGrid Workshop on Grid Programming Models, Grid and P2P System Architecture, Grid Systems, Tools and Environments, Juni 2007.
 - [13] S. Plantikow, A. Reinefeld und F. Schintke, *Transactions for distributed Wikis on structured overlays*, in Clemm et al. [5], S. 256–267.
 - [14] A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Device and method for retrieving/storing electronic data in a system with a plurality of data processing units*, United States Patent Application Publication No. US 2007/0165619 A1, Juli 2007.
 - [15] A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *P2P Routing of Range Queries in Skewed Multidimensional Data Sets*, Report 07-23, ZIB, 2007.
 - [16] A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Vorrichtung und Verfahren zum Abrufen/Speichern von elektronischen Daten in einem System mit mehreren Datenverarbeitungseinheiten*, Europäisches Patent EP 1 744 257 A1, Januar 2007.

- [17] A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Vorrichtung und Verfahren zum Speichern/Abrufen von Objekten mit mehrdimensional adressierten, elektronischen Daten*, Europäische Patentanmeldung Nr. 06012030.0 vom 12.06.2006, Patent Nr: 1868114, 2007.
- [18] T. Schütt, F. Schintke und A. Reinefeld, *A structured overlay for multi-dimensional range queries*, Euro-Par Conference (T. P. Anne-Marie Kermarrec, Luc Bougé, Hg.), LNCS, Bd. 4641, Springer, August 2007, S. 503–513.
- [19] L. M. Silva, J. Alonso, P. Silva, J. Torres und A. Andrzejak, *Using virtualization to improve software rejuvenation*, IEEE International Symposium on Network Computing and Applications (IEEE-NCA), July 2007, Best Application Paper Award.
- [20] P. Sobe und K. Peter, *Combining compression, encryption and fault-tolerant coding for distributed storage*, 21th International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2007) Proceedings, IEEE, 2007, S. 1–8.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Andreas Bley

- Dissertationspreis 2007 der Gesellschaft für Operations Research (GOR)

Timo Berthold

- Diplomarbeits-Hauptpreis 2007 der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV)
- Diplomarbeitspreis 2007 der Gesellschaft für Operations Research e.V. (GOR)

Peter Deuffhard

- ICIAM-Maxwell-Preis 2007 „für originäre, tiefgreifende und unvergleichliche Verdienste in der angewandten Mathematik“

Andreas Eisenblätter

- „Best Paper Award“ der Konferenz IEEE WoWMoM’07, Helsinki, für den Beitrag „Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment“

Hans-Florian Geerdes

- „Best Paper Award“ der Konferenz IEEE WoWMoM'07, Helsinki, für den Beitrag „Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment“

Martin Grötschel

- Ehrendoktorwürde der Vietnamesischen Akademie der Wissenschaft und Technik (VAST)

Dagmar Kainmüller

- Erster Preis im MICCAI-Wettbewerb „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, Preisklasse: automatische Lebersegmentierung

Arie M. C. A. Koster

- Ruf auf eine Stelle als Assistant Professor an der Warwick Business School an der Universität Warwick in Coventry, Vereinigtes Königreich

Hans Lamecker

- Erster Preis im MICCAI-Wettbewerb „3D segmentation in the clinics: A grand challenge“, Preisklasse: automatische Lebersegmentierung

Brigitte Lutz-Westphal

- Ruf auf eine W2-Professur für Mathematik und ihre Didaktik an der Hochschule Vechta

Gerd Teschke

- Ruf auf eine W2-Professur für Mathematik an die Hochschule Neubrandenburg

WISSENSCHAFTLICHE DIENSTLEISTUNGEN

3.1 Überblick

Die Abteilung „Wissenschaftliche Informationssysteme“ tritt mit dem Jahresende 2007, zugleich dem Ende des Berichtszeitraumes, in eine neue Phase ein. Für den KOBV beginnt nach 10 Jahren – davon die ersten drei Jahre als Projekt – mit der Unterzeichnung eines *Vertrages zur Strategischen Allianz* mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) im Dezember 2007 ein neuer Abschnitt. Die Math-Net- und Computeralgebra-Gruppe steht nach dem Abschluss des Schwerpunkt-Projektes *Math&Industry* vor neuen Aufgaben. Dem Museumsprojekt, dessen Arbeit in Kooperation mit dem vormaligen Institut für Museumskunde, das 2007 zum Institut für Museumsforschung aufgewertet wurde, eine inhaltliche Anreicherung erfuhr, eröffnen sich möglicherweise neue Chancen.

Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Der Wandel des KOBV hat grundsätzliche Züge.

Vor dem Hintergrund neuer Entwicklungen in der Bibliothekslandschaft ist im Laufe der Strategiediskussion im KOBV die Erkenntnis gewachsen, dass das bisherige Verbundmodell, das auf der lokalen Katalogisierung basiert, an seine Grenzen gekommen ist. So ist der Austausch gescannter Inhaltsverzeichnisse zur Datenanreicherung der Kataloge, die mit hohem Aufwand erstellt werden, aufgrund der komplexen Prozeduren zur Nachnutzung nur in einem größeren Katalogisierungsverbund zu erreichen. Ein Kernpunkt der Strategischen Allianz ist der Aufbau einer gemeinsamen Verbunddatenbank mit dem BVB, in die die Hochschulbibliotheken des KOBV künftig ihre Katalogisate einbringen.

Der KOBV wird die Zukunft gemeinsam mit dem BVB in einer strategischen Allianz gestalten. Ein weiterer Kernpunkt der Zusammenarbeit ist die Durchführung gemeinsamer Entwicklungsprojekte. Beide Verbünde wahren dabei ihre institutionelle Selbständigkeit. Durch die Entwicklung neuer Angebote für die Benutzer sollen insbesondere die beteiligten Bibliotheken in die Lage versetzt werden, ihre Leistungsfähigkeit innerhalb ihrer Einrichtung – bei knapper werdenden Finanzmitteln und Personalressourcen – zu steigern.

Zu den Projekten Math-Net, Math&Industry und Computeralgebra: Der weitaus umfangreichste Teil der Projekte, die im Infrastrukturbereich der Wissenschaftlichen Dienstleistungen laufen, besteht aus Weiterentwicklung und Pflege laufender Systeme, Upgrades auf neuere Module, Evaluation neuer Techniken, Beurteilung von technischen Trends sowie entsprechenden Koordinierungsarbeiten bei Kooperationspartnern und Anwendern. Nicht anders ist es bei den Projekten *Math-Net* und *Computeralgebra*, über die weiter unten etwas ausführlicher zu berichten ist. Mit *Math&Industry* kam ein langjähriges Projekt zu einem erfolgreichen Abschluss, mit dessen Hilfe der Projektträger/Projektförderer selbst weiterarbeiten wird, um die von ihm geförderten Industrie-orientierten mathematischen Projekte durch Werkzeuge des Semantic Web und der Internet-Präsenz zu unterstützen. Dabei geht es von systematischen Informationen über die Projekte selbst, über die Sammlung und Konzentration von Expertenwissen bis hin zu gedruckten und Web-Publikationen (Proceedings), die aus den Anwendungen entstehen.

Zum Museumsprojekt: Herausragendes Entwicklungsergebnis des Museumsprojektes waren der Aufbau und die Einführung einer Online-Plattform „museums-vokabular.de“ im Rahmen der Fachgruppe „Dokumentation“ im Deutschen Museumsbund, die sich dem Austausch und der Normierung von Museumsdaten widmet. Hierfür hat das Museumsprojekt in Kooperation mit dem Institut für Museumsforschung einen Web-basierten Server für den offenen Austausch von Thesauri und Systematiken aus dem Museumsbereich aufgesetzt, der mittels Web-Services (Stichworte: XML, SOAP und Simple Knowledge Organisation System) von interessierten Museen beschickt und abgefragt werden kann. Das Museumsprojekt arbeitet ebenso wie die Fachgruppe Dokumentation auf internationaler Ebene eng mit der CIDOC-Gruppe (Le comité international pour la documentation des musées) sowie maßgebenden Institutionen aus dem Museumsbereich, wie z. B. dem Getty-Institut zusammen, um seine Ergebnisse (bzgl. der Formate und Metadaten) in die internationalen Standardisierungen, konkret: das *Conceptual Reference Model* der CIDOC, einzupassen.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Agnieszka Brockmann (seit 01.09.2007), Hildegard Franck, Martin Grötschel, Karin Herm (seit 01.01.2007), Andres Imhof (bis 30.04.2007), Uta Kaminsky (FAK), Anja Kammel (FAK; seit 01.10.2007), Katja Kummer (FAK; bis 30.09.2007), Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Gunar Maiwald (seit 01.06.2007), Raluca Radu, Beate Rusch, Sibylle Volz

Kooperationspartner: Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg,

Friedrich-Althoff-Konsortium e. V. (FAK)

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

Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Das Jahr 2007 stand für den KOBV im Zeichen der Verhandlungen mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) über eine künftig engere Zusammenarbeit der beiden Verbände. Die Gespräche waren Ende 2006 auf Initiative des KOBV aufgenommen worden, nachdem das Kuratorium im Rahmen seiner Strategiediskussion über die Weiterentwicklung des KOBV einstimmig dafür votiert hatte. An den Verhandlungsgesprächen war die KOBV-Zentrale aktiv beteiligt. In der im Dezember 2007 unterzeichneten „Vereinbarung zur Strategischen Allianz“ haben BVB und KOBV als übergeordnete Ziele der Kooperation den Auf- und Ausbau kontinuierlich optimierter Services für die Benutzerinnen und Benutzer bei gleichzeitiger Effizienzsteigerung für die Bibliotheken formuliert. Einer der beiden Kernpunkte der Vereinbarung ist die Durchführung gemeinsamer Entwicklungsprojekte. Dafür werden zwei, je zur Hälfte von BVB und KOBV finanzierte Entwicklerstellen eingesetzt. Der Entwicklungsbereich wird der KOBV-Zentrale zugeordnet, die durch ihre seit Jahren aufgebaute Entwicklungskompetenz und ihre Einbindung in das ZIB ideale Voraussetzungen dafür bietet. Ein weiterer Schwerpunkt der Vereinbarung ist der Aufbau einer gemeinsamen Verbunddatenbank, die vom BVB betrieben wird. Die beteiligten Bibliotheken beider Verbände katalogisieren ihre Bestände künftig kooperativ in dieser gemeinsamen Datenbank. Hierdurch entstehen bedeutende Synergiegewinne vor allem bei der Datenübernahme und Kataloganreicherung. Mit rund 20 Millionen Titeldatensätzen entsteht zudem die zweitgrößte Verbunddatenbank in Deutschland.

Sämtliche Arbeitsbereiche der KOBV-Zentrale waren 2007 von den Verhandlungen und Planungen zur strategischen Allianz mit dem BVB geprägt. Es galt, bereits vor dem Ende der Vertragsverhandlungen bei diversen Einzelarbeiten und Planungen die Auswirkungen der anvisierten Kooperation mit zu berücksichtigen. Von der Zusammenarbeit mit dem BVB mit am stärksten berührt ist der Arbeitsbereich „Fremddaten/Datenhaltung/Verbunddaten“. In diesem Bereich hat die KOBV-Zentrale die Arbeiten soweit wie möglich in Abstimmung mit dem BVB durchgeführt. Als Beispiel ist die Zusammenarbeit bei der 2008 anstehenden Umstellung des Austauschformats von MAB2 auf MARC21 zu nennen, zu dem die Vorarbeiten seit Jahresmitte 2007 in intensiver Form angelaufen sind. Bei der Spezifikation und den konzeptionellen Überlegungen zum Formatumstieg kommt der KOBV-Zentrale, die hier eng mit dem BVB und darüber hinaus mit den Aleph-Verbänden *Hochschulbibliothekszentrum Nordrhein-Westfalen (HBZ)* und *Österreichische Bibliothekenverbund und Service GmbH (OBVSG)* kooperiert, aufgrund ihrer Erfahrungen und ihrer Vernetzung mit überregionalen fachlichen Expertengruppen eine tragende Rolle zu. Weiterhin sind die Arbeiten zum Migrationskonzept zu nennen: Als Vorbereitung zur Katalogisierung der KOBV-

Bibliotheken in die gemeinsame zentrale Datenbank sind die Daten der Bibliotheken in die bereits bestehende Verbunddatenbank im BVB zu migrieren. Die KOBV-Zentrale hat federführend gemeinsam mit den KOBV-Bibliotheken und dem BVB ein Migrationskonzept erarbeitet, das seit Anfang Oktober 2007 in einer mit dem BVB abgestimmten Fassung vorliegt; es ist im Zuge der Migration kontinuierlich fortzuschreiben. Als Eckpunkte für den zeitlichen Rahmen der Migration haben die Verbände im Vertragsentwurf Anfang 2008 für den Beginn und Ende 2009 für das Ende vorgesehen.

Ein weiteres großes Thema 2007 war die Revision der KOBV-Internet-Angebote. Als Basis dienten die Kommentare der Online-Nutzerbefragung 2006/2007, die von einer internen Arbeitsgruppe der KOBV-Zentrale ausgewertet und zum Anlass für grundsätzliche konzeptionelle Überlegungen genommen wurden. Schwerpunkt war das KOBV-Portal, dessen Unübersichtlichkeit und schwierige Handhabung besonders beklagt worden waren. Für das Portal ist die Software MetaLib/SFX der Firma Ex Libris im Einsatz und die KOBV-Zentrale kann Navigation/Oberfläche nur bedingt ändern. Deren Überarbeitung hat die KOBV-Zentrale in der ersten Jahreshälfte abgeschlossen und alle die Software betreffenden Nutzerkommentare an Ex Libris weitergegeben. Die grundlegende konzeptionelle Überarbeitung des Portals zielt auf die Schärfung des Profils als regionaler Service sowie auf die stärkere Ausnutzung von Synergien durch Verlinkung mit überregionalen Angeboten. So wurden die im KOBV-Portal recherchierbaren e-Ressourcen radikal reduziert und statt dessen Links zu den Virtuellen Fachbibliotheken gelegt, die gebündelt Informationen für ihre Fächer anbieten und pflegen. In der zweiten Jahreshälfte hat die KOBV-Zentrale ihre Diskussion auf Maßnahmen zur stärkeren Integration sämtlicher KOBV-Internet-Angebote ausgeweitet; diese dauert über das Jahr 2007 hinaus an. Eine erste Maßnahme war der Relaunch der KOBV-Webseiten, die inhaltlich überarbeitet, hinsichtlich der Barrierefreiheit gemäß den BITV-Richtlinien optimiert und zum Beginn des Wintersemesters freigeschaltet wurden. Im Rahmen des Relaunch hat die KOBV-Zentrale das Open-Source Content Management System Typo3 eingeführt, das künftig die komfortable Einbindung und Verwaltung von Web2.0-Elementen, wie beispielsweise RSS-Feeds, erlaubt.

Im Entwicklungsbereich hat die KOBV-Zentrale 2007 die Suchmaschinentechologie auf Basis der Open-Source-Programmbibliothek *Lucene* im KOBV etabliert. In der ersten Jahreshälfte wurden die Daten des KOBV-Volltextservers mit *Lucene* indiziert, die Rechercheoberfläche neu aufgebaut und die technische Plattform konsolidiert. Die Arbeiten des Entwicklerinnenteams waren in der zweiten Jahreshälfte bestimmt durch ein Projekt zur Entwicklung einer *Lucene*-Anwendung für Bibliotheken, das in einer ersten Stufe erfolgreich abgeschlossen wurde: Ende Oktober hat die Pilotbibliothek *Wissenschaftspark Albert Einstein Potsdam (WAE)* das neu entwickelte Recherchetool in Betrieb genommen.¹

¹<http://waesearch.kobv.de>

Für die Benutzer stellt das Recherchetool einen großen Fortschritt dar: Es ersetzt die Suche im Opac des WAE und erschließt über den Opac hinaus weitere fachspezifische Suchräume – insgesamt 12 Datenquellen (die beiden Kataloge des WAE, Zeitschriftenlisten, e-Books, bibliographische Listen, RSS-Feeds, Teile der virtuellen Fachbibliothek *GeoLeo* usw.). Die Suchergebnisse werden in Sekundenschnelle angezeigt und können komfortabel weiter verarbeitet werden. Aufgrund des großen Interesses in den Bibliotheken – bei der KOBV-weiten Präsentation im Dezember nahmen 70 Mitarbeiter aus 25 Bibliotheken teil – plant die KOBV-Zentrale, aus der Anwendung 2008 einen ASP-Dienst für Bibliotheken aufzubauen. Zum Jahresende ist die Weiterentwicklung des KOBV-Volltextservers, für den seit Juli 2007 weitere fachliche Spezifikationen, wie beispielsweise ein fachliches Browsing, erarbeitet wurden, auf der technischen Ebene wieder aufgenommen worden. Bei der Weiterentwicklung der beiden Lucene-Anwendungen werden – wie bereits bei der Entwicklung – Synergien, die sowohl auf der fachlichen als auch auf der technischen Ebene in hohem Maße entstehen, wechselseitig genutzt. Im Rahmen ihrer Funktion als regionaler Dienstleister für die Bibliotheken hat die KOBV-Zentrale in den vergangenen Jahren ein ganzes Bündel von ASP (Application Service Providing)-Dienstleistungen aufgebaut, die auch 2007 kontinuierlich verbessert und weiter ausgebaut wurden:

- Am ASP-Dienst „automatisierte Fernleihe“/„Online-Fernleihe“ und dem daran gekoppelten, von der KOBV-Zentrale eingerichteten Abrechnungsverfahren nehmen inzwischen 67 Bibliotheken teil, davon 47 Bibliotheken aus dem VÖB Brandenburg. 10 KOBV-Bibliotheken bieten ihren Benutzern zudem die Online-Fernleihe an, mit der ein Benutzer selbst online im KOBV-Portal bestellen kann. Im Laufe des Jahres 2007 hat die KOBV-Zentrale mittels der durchgeführten Programmierarbeiten die Ergonomie für die Bibliotheksmitarbeiter weiter verbessert. Sämtliche Erweiterungen und ihre Auswirkungen auf den Workflow wurden in das Fernleih-Handbuch eingearbeitet, das im November 2007 in der 2. Auflage veröffentlicht wurde. Einen großen Fortschritt für die KOBV-Fernleihe insgesamt stellt die Freigabe der Online-Fernleihe für die Benutzer des VÖB dar, die nach ausführlichen Tests unter Beteiligung der KOBV-Zentrale im November erfolgte. Ebenfalls im November wurde aus dem Kreis der überregionalen AG Leihverkehr ein DFG-Antrag zur Implementierung eines verbundübergreifenden Informationsdienstes für Bibliotheksdaten gestellt, an dem sich die KOBV-Zentrale mit anderen Verbänden beteiligt; der Antrag ist Ende 2007 noch in der Begutachtung.
- Den ASP-Dienst „Opus- & Archivierungsdienste“, in dessen Rahmen die KOBV-Zentrale eine konsortiale Opus-Instanz betreibt, nutzen Ende 2007 14 Publikationsserver im Produktivbetrieb. Im September 2007 hat die UB Potsdam als erste KOBV-Bibliothek das „DINI-Zertifikat Dokumenten- und

Publikationsservice 2007“ erhalten, ein in der Open-Access-Bewegung hoch angesehenes Qualitätssiegel. Im Rahmen der Begutachtung hat der technische Service, der von der KOBV-Zentrale für alle Instanzen bereitgestellt wird, das Zertifizierungsverfahren ebenfalls erfolgreich durchlaufen. Von den Gutachtern ausdrücklich positiv hervorgehoben wurde die arbeitsteilige Konzeption im KOBV, in der die KOBV-Zentrale für die technischen Belange zuständig ist und die Bibliotheken sich nur noch um bibliothekarisch-fachliche Dinge kümmern müssen. Im Rahmen ihrer Mitarbeit an der Weiterentwicklung von Opus hat sich die KOBV-Zentrale im September gemeinsam mit anderen Verbänden an einem DFG-Antrag zur Erweiterung der Opus-Funktionalitäten beteiligt; der Antrag hat gute Aussichten auf eine erfolgreiche Begutachtung.

- Im ASP-Dienst „Hosting-Service für Virtuelle Fachverbände“ hat die KOBV-Zentrale 2007 mit dem *VK Noten* den nunmehr dritten Verbundkatalog zur Produktionsreife gebracht.
 - Der *VK Film* mit den beiden Komponenten „Film“ und „Gesamtbestand“ wurde 2007 um einen neuen Teilnehmer erweitert, so dass nun 15 Filmbibliotheken bundesweit recherchierbar sind. Mit einem Nachweis von mehr als 200.000 Filmen (DVDs, Videos) und 400.000 Bänden Filmliteratur ist der *VK Film* das Rechercheinstrument für Filme und Filmliteratur in Deutschland. Im Deutschen Filmportal ist der *VK Film* die Komponente zur Literaturrecherche.
 - Im *VK Judaica* sind 2007 unverändert sieben regionale Bestände nachgewiesen.
 - Der *VK Noten*, in dem zunächst die Notenbestände aus vier regionalen Bibliotheken absuchbar sind, ist Ende 2007 in technischer Hinsicht produktionsbereit; es fehlt noch die Zustimmung zur Freigabe durch die beteiligten Bibliotheken.
- Im Rahmen des ASP-Dienstes „KOBV-Portal – Konsortialportal – Open-Linking-Dienste“ hat die KOBV-Zentrale 2007 Maßnahmen für künftig stärkere Synergiegewinne eingeleitet und mit den beteiligten Bibliotheken kooperative Verfahren abgestimmt. Der ASP-Dienst für die Linking-Software SFX wurde im Laufe des Jahres um fünf Einrichtungen erweitert, so dass am Jahresende 14 Einrichtungen den SFX-Dienst in Anspruch nehmen, davon vier in Kombination mit der Portalsoftware MetaLib.
- Bis Jahresende leider nicht zum Abschluss gebracht werden konnte die Inbetriebnahme der Software *Verde*, die die KOBV-Zentrale künftig ebenfalls im Rahmen eines ASP-Dienstes betreuen wird. Die Software zur Verwaltung von elektronischen Medien (Electronic Resource Management, ERM), ein neues Produkt der Firma Ex Libris, ist 2006 von den Mitgliedern des

Friedrich-Althoff-Konsortiums e. V. (FAK) sowie der Universitätsbibliothek der Freien Universität Berlin und der Medizinischen Bibliothek der Charité mit einer Konsortial-Instanz (zum lesenden Zugriff für die Mitglieder des FAK) und zwei lokalen Instanzen beschafft worden.

Mit der Zielsetzung, bis Ende des Jahres 2007 mit Verde in Produktion zu gehen, hat Ex Libris Mitte 2007 ein Implementation-Partner-Programm aufgesetzt, an dem das FAK, die Freie Universität und die KOBV-Zentrale beteiligt sind. Diese Vorgehensweise bedeutet für die Beteiligten zwar einen relativ hohen Aufwand, bietet gleichzeitig aber die Chance, dass die Ex Libris-Entwicklungsabteilung die Produktionsaufnahme technisch begleitet und dass die Workflows und organisatorisch-technischen Überlegungen aus dem Projekt direkt in die Systementwicklung mit einfließen. Bis Ende des Jahres 2007 wurden gravierende Mängel der Software behoben. Die für den konsortialen Einsatz zwischen den Partnern als unverzichtbar erkannten Funktionalitäten sind noch nicht vollständig implementiert, doch die Aufnahme des produktiven Betriebes ist in Sichtweite gerückt.

Im Bereich Strategische Weiterentwicklung hat eine Arbeitsgruppe des KOBV-Kuratoriums die *Balanced Scorecard* nach nunmehr zweijährigem Einsatz evaluiert und insgesamt als brauchbares Controlling-Instrument bestätigt. Von November 2007 bis Januar 2008 laufen zum dritten Mal die beiden Online-Umfragen für NutzerInnen und BibliotheksmitarbeiterInnen. 2007 war für den KOBV auch insofern ein besonderes Jahr, als 10 Jahre zuvor das KOBV-Projekt initiiert worden war. Die Bedeutung, die der KOBV seitdem als regionaler Dienstleister für die Bibliotheken gewonnen hat, wurde beim KOBV-Forum deutlich, das die KOBV-Zentrale im Juli unter dem Motto „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“ durchführte und an dem mehr als 100 Personen teilnahmen.

3.2.2 Math-Net und Math&Industry

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Wolfram Sperber, Robert Roggenbuck

Kooperationspartner: Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) der International Mathematical Union (IMU), Fachgruppe „Information und Kommunikation“ der Deutschen Mathematiker-Vereinigung/Österreichischen Mathematischen Gesellschaft (DMV/ÖMG), Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück, Projektträger Jülich

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Math-Net: Das Math-Net-Projekt versteht sich heute in erster Linie als Koordinierungsstelle der Aktivitäten im IuK-Bereich der Mathematik. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Evaluation neuer Techniken und der Beobachtung von Trends, die für die Bereitstellung und Verbreitung von Mathematik bedeutend sind. Die Verwendung von modernen Internettechnologien spielt hierbei weiterhin eine do-

minante Rolle. Darüberhinaus gestaltet die Arbeitsgruppe seit Jahren die Fachgruppe Information und Kommunikation der DMV und ÖMG aktiv mit. Wie auch in den Jahren zuvor, veranstalteten wir wiederum ein zweitägiges Minisymposium auf der jährlich stattfindenden DMV-Tagung. Der diesjährige Schwerpunkt lag auf der "Kollaborativen Arbeit im Web".

Math&Industry: Das Projekt Mathematik für Innovationen in Industrie und Dienstleistungen: Weiterentwicklung und Ausbau des Internet-Informationsdienstes Math&Industry wurde im vergangenen Jahr erfolgreich abgeschlossen. Mit dem Projekt wurde ein Konzept für ein Internet-Portal entwickelt und realisiert, das das Mathematikprogramm des BMBF umfassend präsentiert². Das Portal basiert auf

- einheitlich strukturierten Informationen der Projekte
- Informationen über das Förderprogramm

Das innovative Konzept von Math&Industry wertet mittels der Techniken des Semantic Web die Web-Präsentationen der Förderprojekte aus und stellt für die verschiedenen Nutzergruppen Mehrwertdienste, etwa ein Glossar oder eine Expertendatenbank, bereit. Das Konzept von Math&Industry geht von einem dezentralen Ansatz aus, das heißt, jedes Projekt soll sich mit seinen Informationen in den Aufbau des Informationsportals einbringen. Um die Informationen auswertbar zu machen, wurden standardisierte Web-Präsentationen für die verschiedenen Aspekte eines Projekts entwickelt. Semantische, in RDF/XML kodierte Metadaten sind die Grundlage für die automatische Auswertung der Informationen der Projekte. Mit den im Projekt entwickelten Werkzeugen ist eine einfache und syntaktisch korrekte Erstellung der Web-Seiten eines Projekts möglich.

Im Berichtszeitraum konzentrierten sich die Aktivitäten auf

- die Weiterentwicklung der Expertendatenbank
- die Anpassung und Umsetzung des Math&Industry-Konzepts auf das Förderprogramm „Netzwerke Grundlagenforschung Erneuerbare Energien und rationale Energieanwendung“ (NGEE)³

Mit der Expertendatenbank ist nach dem Glossar ein zweiter Mehrwertdienst entstanden, der Informationen von Projektmitarbeitern, etwa die Expertisegebiete aus den Web-Präsentationen der Projekte auswertet und zusammenfasst. Mit einer Datenbankanbindung wurde ein Schnittstelle geschaffen, die es auch „externen“ Spezialisten (Personen, die nicht in Projekte des BMBF-Mathematikprogramms involviert sind) ermöglicht, sich in der Expertendatenbank zu registrieren. Weitere Mehrwertdienste, etwa eine Publikationsdaten- oder eine Produktdatenbank, können in analoger Weise aufgebaut werden. Hierzu wurden im Berichtszeitraum Vorschläge erarbeitet.

²<http://www.mathematik-21.de/>

³<http://www.ngee.de>

Das Konzept von Math&Industry wurde in Zusammenarbeit mit dem Projektträger Jülich für das neue BMBF-Förderprogramm NGEE angepasst. Das Forschungsprogramm NGEE ist anders als das Mathematikprogramm organisiert. So arbeiten die Projekte etwa in Verbänden zusammen, was eine zusätzliche Ebene im Portal erforderlich macht. Auch die inhaltliche Strukturierung der Web-Präsentationen der Projekte musste an die Schwerpunkte und Erfordernisse des Programms angepasst werden. Damit einher ging die technische Überarbeitung und Flexibilisierung des Erstellungswerkzeugs der Web-Präsentation, des Web-SiteMakers. Das soll auch die Nutzung des Konzepts und der Werkzeuge in weiteren Förderprogrammen vereinfachen.

Der Informationsdienst wurde nach Abschluss des Projektes vom Projektträger Jülich weiterentwickelt und betreut. Die umfangreiche im Projekt erstellte Software läuft stabil. Die Weiterentwicklung des Web, etwa von XML und RDF, erfordert aber auch die permanente Anpassung der in Math&Industry entwickelten Werkzeuge. Auch der Aufbau neuer Mehrwertdienste ist wünschenswert. Insbesondere muss aber die Bereitstellung der Informationen durch die Projekte weiter propagiert und gefördert werden.

Das Konzept von Math&Industry diene auch anderen Initiativen, etwa zum Aufbau eines Portals zur Landschaftsforschung⁴, als Grundlage.

3.2.3 Computeralgebra (REDUCE)

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Herbert Melenk

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

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln, anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt von REDUCE liegt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen befindet sich am ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über das Web abgewickelt (gemeinsame

⁴<http://openlandscapes.zalf.de/>

Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweitem Update). Im Berichtszeitraum wurde die Version REDUCE 3.8 weiterhin verbessert, und noch vorhandene Fehler wurden beseitigt.

Eine wesentliche Neuerung ist die REDUCE-Version für alle marktüblichen 64-bit-Prozessoren, die es erlaubt, den gesamten Speicher moderner Rechner zu verwenden. Im Berichtszeitraum wurde eine Version für Macintosh-Rechner mit Intel-Prozessoren ebenfalls im 32-bit- und 64-bit-Modus erstellt, die das Angebot abrundet.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Es ist ihm gelungen, einige tiefliegende Probleme in der aktuellen REDUCE-Version zu beheben. Des Weiteren arbeitet er an einer Implementierung der Faugère'schen Algorithmen zur Berechnung von Gröbnerbasen.

Die Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf auf dem Gebiet der *parallelen Computeralgebra* wurde fortgesetzt. Eine wesentliche Erweiterung der Möglichkeiten zum parallelen Rechnen ist durch den Zugang zu den Rechnern des SHARCNET gegeben. Dieses Netzwerk von Hochleistungsrechnern ist im Osten Kanadas angesiedelt und steht der Brock University offen. Thomas Wolf ist der lokale Koordinator für das SHARCNET an der Brock University. Für die Cluster im SHARCNET hat Thomas Wolf eine experimentelle parallele Version seiner Software CRACK erstellt. Die Resultate dieser Zusammenarbeit wurden auf einem Workshop am MSRI, Berkeley, USA im Februar 2007 vorgestellt. Nach langer Pause wird die parallele Computeralgebra auch in der Computeralgebragemeinde wieder mehr wahrgenommen. Es gibt erneut spezielle Konferenzen (z. B. PASCO 2007) und Workshops zu diesem Thema. Das mag mit den neuerdings zur Verfügung stehenden Parallelrechnern auf dem Schreibtisch (Multicore PCs) zusammenhängen.

Die *Präsentation des Systems REDUCE im World Wide Web* (WWW) ist an vielen Serversystemen zugänglich. Eine neue Website wurde durch Anthony C. Hearn erstellt und dient seitdem als Referenz: <http://www.reduce-algebra.com>.

Spezielle Information für die Distributionen des ZIB findet sich auch bei: <http://www.zib.de/SIS/Software>.

In Zusammenarbeit mit Fritz Schwarz vom Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen und mit finanzieller Unterstützung durch die Fraunhofer-Gesellschaft wurde am REDUCE-ALLTYPES-Testserver im ZIB weitergearbeitet. Dieser Server soll Interessenten, die nicht über eine REDUCE-Installation verfügen, die Benutzung von ALLTYPES ermöglichen und so neue Kunden werben. Die Arbeiten wurden im Berichtszeitraum im Wesentlichen abgeschlossen und auf der Konferenz ISSAC 2007 im Rahmen eines Tutorials präsentiert.

Eine weitere Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf besteht auf dem Gebiet des E-Learning. Es wurde ein Testverfahren für Studienanfänger der Mathematik der Brock University entwickelt und kontinuierlich weiterentwickelt.

Diese Kooperation wurde auf der Konferenz ACA 07 in Detroit vorgestellt. Es haben inzwischen andere Institute der Brock University ihr Interesse an ähnlichen Systemen bekundet.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 5.100 Euro erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegsversion, die bei einem Preis von 99 US\$ auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht. Die fertiggestellte Version für Prozessoren, die dem neuen 64-bit-Standard entsprechen, hat ebenfalls die Nachfrage belebt.

Publikationen

- [1] A. C. Hearn, *REDUCE User's and Contributed Packages Manual, Version 3.8*, Santa Monica, 2004.

3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: Carlos Saro, Regine Stein, Ronni Grapenthin (bis August 2007), Jean Francois Regis Manga Ekobena, Elvira Gering, Dennis Lucke-Schenk
Kooperationspartner: Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IfM), Bayerisches Nationalmuseum (BNM), Deutsches Historisches Museum (DHM), Museum im Wasserwerk (Friedrichshagen), Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG (Bielefeld), Kulturhistorisches Museum Rostock, Stadtgeschichtliches Museum Leipzig, Pommersches Landesmuseum Greifswald, Medizinhistorisches Museum Berlin, Erinnerungsstätte Notaufnahmelager Marienfelde, Stiftung Deutsche Kinemathek

Aufgabe der Arbeitsgruppe ist einerseits die EDV-technische Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen sowie andererseits die Vermittlung und Verbreitung international anerkannter Standards in die deutsche Museumswelt. In interdisziplinärer Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern verschiedener geisteswissenschaftlicher Fachrichtungen werden Projekte durchgeführt, die den Museen die Nutzung moderner Informationstechnik erschließen. Durch enge Kontakte zu entscheidenden Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und der CIDOC (Le comité international pour la documentation des musées), hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation jährlich durchgeführte Herbsttagung zur Museumsdokumentation findet seit 15 Jahren traditionell am ZIB statt.

Die im Rahmen der genannten Fachgruppe Dokumentation gegründete Arbeitsgruppe „Datenaustausch“ wird von Mitarbeitern des ZIB koordiniert. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit den Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten und untersucht (Metadaten-) Formate auf ihre Anwendbarkeit für die Bedürfnisse der unterschiedlichen Samm-

lungen. Grundlage dafür ist das von der CIDOC entwickelte objektorientierte „Conceptual Reference Model“ (CRM, [urlhttp://cidoc.ics.forth.gr](http://cidoc.ics.forth.gr)), das sich als „Domain ontology“ (im informationstechnischen Sinn) versteht und 2006 als ISO-Standard ISO 21127:2006 publiziert wurde. Im Jahre 2007 wurde von der Arbeitsgruppe das Datenpublikationsformat „MuseumDat“⁵ verabschiedet, das die Weitergabe von Metadaten an Museumsportale vereinfacht. Es wurde außerdem eine Kooperation mit dem Getty-Trust mit dem Ziel der Vereinheitlichung vorliegender Formate zu einem gemeinsamen internationalen Standard begonnen.

Das ZIB war maßgeblich an der Gründung der Initiative „museumsvokabular.de“ beteiligt, welche im Mai 2006 mit einer Online-Plattform⁶ ans Netz ging und auf ein breites Interesse über die Fachgruppe Dokumentation hinaus stößt. Ziel der Initiative ist die Bereitstellung, Weiterentwicklung und Angleichung von in der Museumsdokumentation verwendetem kontrolliertem Vokabular in einem gemeinsamen Portal.

Zur Vereinfachung des Software-unabhängigen Einsatzes von Thesauri, Systematiken u. ä. wurde vom ZIB insbesondere die Entwicklung eines auf offenen und verbreiteten Standards basierenden WEB-Services vorgeschlagen (SKOS – Simple Knowledge Organisation System zur Datenstrukturierung, SOAP als Kommunikationsprotokoll, XML als allgemeines Datenaustauschformat). Der Service ermöglicht den plattformunabhängigen Zugriff auf von unterschiedlichen Einrichtungen und mit verschiedenen DBMS bereitgestellte Vokabulare. Nachdem vom ZIB bereits Anfang 2006 ein Prototyp auf einem Workshop vorgestellt und eine Schnittstellendefinition vorgeschlagen wurde, fand im Sommer 2007 die Abstimmung mit anderen Software-Herstellern statt. Bei der Herbsttagung zur Museumsdokumentation im Oktober 2007 konnten neben dem ZIB zwei weitere Anbieter von Museums-Software eine Implementierung des WEB-Services vorführen. Da Vorhaben in Bereich der Museumsdokumentation im allgemeinen auf größere Zeiträume ausgerichtet sind, erwarten die beteiligten Institutionen eine kontinuierliche Zusammenarbeit. So besteht zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Weitere wichtige Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum (seit 1991), dem Bayerischen Nationalmuseum in München (seit 1995), dem Museum im Wasserwerk Friedrichshagen (seit 1998) und dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig (seit 2001) sowie mit einigen anderen Museen. Die Arbeitsgruppe finanziert sich damit weitestgehend aus Drittmitteln.

Basissoftware für alle Projekte ist das von der britischen Museum Documentation Association (MDA) speziell für den Einsatz zur Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS. Es ermöglicht die Verarbeitung

⁵<http://www.museumdat.de>

⁶<http://www.museumsvokabular.de>

komplexer Informationsstrukturen und erlaubt dadurch die Beschreibung auch komplizierter Objektzusammenhänge ohne Informationsverlust. Das Programm wird bereits seit 1981 vom ZIB weiterentwickelt und kostenlos an interessierte Museen weitergegeben.

Ein Schwerpunkt bei der Entwicklung ist die möglichst vielseitige Verwendung einmal erfasster Daten. So werden die bei der Inventarisierung der Objekte gewonnenen Daten für verschiedenste wissenschaftliche und verwaltungstechnische Vorgänge genutzt (Ausstellungsvorbereitung, Leihverkehr usw.). Ebenso können die Daten auf unterschiedlichen Medien (Papier, CD, Internet) zur Verfügung gestellt werden, selbstverständlich hat dabei die Publikation von Sammlungsbeständen im Internet besondere Bedeutung: Mit der bereits seit 1996 im Internet zugänglichen Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums⁷ zeichnet das ZIB für die technische Betreuung dieses nach wie vor umfangreichsten Angebots dieser Art in Deutschland verantwortlich.

3.2.5 Studio da Vinci — Forschungslabor Visualisierung

Bearbeitet von: Malte Clasen, Ralf Kähler, Uwe Neumann, Olaf Paetsch, Steffen Prohaska, Stefan Zachow, Abteilung Visualisierung und Datenanalyse

Mit dem Studio da Vinci wurde im Jahr 2007 eine neue Einrichtung eröffnet, die für vielfältige Zwecke, in erster Linie stereoskopische Projektionen, genutzt wird. Für das Studio da Vinci wurde unterhalb des Hörsaals ein vormaliger Technikraum ausgebaut und den Mitarbeitern des ZIBs und der Öffentlichkeit zugänglich gemacht. Das Fassungsvermögen des Studios beträgt je nach Bestuhlung bis zu 25 Personen. Damit hat sich das Raumangebot des ZIBs um eine attraktive Möglichkeit erweitert.

Zentrales Element des Studio da Vinci ist eine stereoskopische Breitwandprojektion; außerdem steht ein Videokonferenzsystem bereit. Sechs Projektoren, die interaktiv erzeugte Bilder von einem Hochleistungs-Grafikrechner erhalten, überlagern jeweils zwei Bilder auf die drei Segmente der gekrümmten Leinwand. Durch Polarisation des Lichts werden diese Bilder den Augen des Betrachters zugeordnet und erzeugen die Illusion einer dreidimensionalen Welt. Zur Bildgenerierung wird die Software Amira (siehe Abschnitt 6.2), die am ZIB entwickelt wird, eingesetzt. Abbildung 3.1 zeigt eine Fotografie des Studio da Vinci aus dem Blickwinkel eines Vorführenden.

Das Studio wurde im Rahmen vielfältiger Veranstaltungen genutzt. Insbesondere bei der Langen Nacht der Wissenschaft 2007 war es Anziehungspunkt und stieß bei den Besuchern auf große Begeisterung. Im Rahmen der alltäglichen Arbeit wird das Studio häufig bei Präsentationen für Gäste genutzt, aber – neben Entwicklungs- und Testarbeiten – auch für Arbeitstreffen der Abteilung Visua-

⁷ <http://www.dhm.de/datenbank>



Abbildung 3.1: Studio da Vinci. Die Fotografie zeigt das Forschungslabor Visualisierung aus dem Blickwinkel eines Vorführenden. Rechts sind die Monitore zu sehen, von denen die Projektion auf der gekrümmten Leinwand in der Bildmitte gesteuert wird. Oben links sind die sechs Projektoren zu sehen, die benötigt werden, um auf den drei Segmente der Leinwand jeweils zwei Bilder zu überlagern. Dies ermöglicht die Darstellung stereoskopischer Bilder.

lisierung und Datenanalyse. Darüber hinaus finden im Studio regelmäßig Video-konferenzen statt.

SUPERCOMPUTING UND NETZE

4.1 Supercomputing am ZIB

Der Bereich Computer Science betreibt im Rahmen des HLRN-Verbunds (Kapitel 4.1.1) das im Jahr 2002 beschaffte, massiv parallele System IBM pSeries 690 vornehmlich für wissenschaftliche Anwendungen aus den sechs norddeutschen Ländern sowie einen Linux-Cluster für Anwender aus dem deutschen Grid-Umfeld. Zudem werden Archivdienste auf dem Datenspeicher SUN StorageTek PowderHorn 9310 ACS angeboten; dieses Archivspeichersystem ist zum Ende des Jahres um ein modernes, leistungsfähigeres Speichersystem SUN StorageTek L 8500 erweitert worden mit dem Ziel, das alte, im Kern seit dem Jahr 1992 in Betrieb befindliche System 2008 abzulösen. Ein weiterer Schwerpunkt im Jahr 2007 war die Beschaffung des massiv parallelen Systems HLRN-II, welches das derzeitige System 2008 ablösen wird.

4.1.1 Hochleistungsrechner HLRN-I

Gemäß dem Verwaltungsabkommen der Bundesländer Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein wird der Hochleistungsrechner HLRN-I als verteilter Supercomputer an den Standorten ZIB Berlin und RRZN Hannover betrieben. Die sechs Bundesländer teilten sich die Investitionskosten in Höhe von ca. 20 Mio. Euro, während die Sitzländer Berlin und Niedersachsen zusätzlich die laufenden Kosten (Wartung, Strom, Klima, usw.) tragen und das erforderliche Betriebspersonal bereitstellen.

Der HLRN-Supercomputer besteht aus den beiden Teilkomplexen in Berlin und Hannover sowie der dedizierten Datenverbindung (HLRN-Link). Er bietet mit seinen insgesamt 1024 IBM Power4-Prozessoren 5,3 TFlop/s Spitzenleistung.

Jeder Teilkomplex umfasst 16 Compute-Server vom Typ IBM pSeries 690 (Regatta-H) mit je 32 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz), davon 14 Systeme mit je 64 GByte, ein System mit 128 GByte und ein System mit 256 GByte Hauptspeicher.

Die Konfiguration dieses Systems hat sich gegenüber dem Vorjahr nicht geändert; Details zur Konfiguration sowie eine Konfigurationsskizze sind hier nicht mehr aufgenommen; man findet diese Informationen im Jahresbericht 2006. Als

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

Die Benutzer erreichen das HLRN-System über die ausgezeichneten Einwählknoten („Login Nodes“) `berni.hlrn.de` und `hanni.hlrn.de`, die über Gigabit-Ethernet-Verbindungen mit den lokalen Netzen von ZIB bzw. RRZN und damit über das X-WiN verbunden sind. Üblicherweise arbeiten die Benutzer interaktiv auf einem dieser Einwählknoten und senden Batch-Jobs mit Angabe der maximalen Rechenzeit und der gewünschten Anzahl Prozessoren zum HLRN-System.

Das HLRN-System unterstützt folgende Methoden der Parallelisierung:

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

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

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

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

Schwerpunkt der Tätigkeit im Berichtszeitraum war, wie auch schon in den Vorjahren, die Bereitstellung eines stabilen Betriebes, nachdem im Jahr 2004 alle

¹Wavelength-Division-Multiplexing, Wellenlängen-Multiplexing

wesentlichen technischen Aufrüstungen durchgeführt wurden. Das System hat seine Kapazitätsgrenze erreicht: Im Jahr 2007 wurden, wie auch schon in den Vorjahren, über 230.000 NPL² an die vom Wissenschaftlichen Ausschuss genehmigten Großprojekte abgegeben.

Das HLRN-System ist stets voll ausgelastet und die Nachfrage übersteigt deutlich die zur Verfügung stehende Kapazität. Das ganze Jahr hinweg liegt ständig eine große Last von Aufträgen in der Warteschlange: Abbildung 4.1 zeigt die Wartezeiten in der Input-Queue für die einzelnen Jobklassen nach dem Betriebsmittelverbrauch über das Jahr 2007. Die Wartezeiten lagen für mehr als 1/4 der aufgenommenen Rechenzeit über 168 h (eine Woche), lediglich während des Ferienmonats August gab es einen gewissen Einbruch in der Abgabe von Aufträgen, so dass nur in dieser Zeit die Wartezeiten in der Regel geringer ausfielen.

Die Einbrüche Ende September und im November hatten ihre Ursache im ungeplanten Ausfall bzw. wegen geplanter Reparaturarbeiten an der Stromversorgung des Teilkomplexes in Hannover durch die Leibniz-Universität Hannover. Der Einbruch im Dezember war verursacht durch einen Ausfall des parallelen Dateisystems im Teilkomplex Berlin nach gleichzeitigem Ausfall zu vieler Bauteile im Plattensystem.

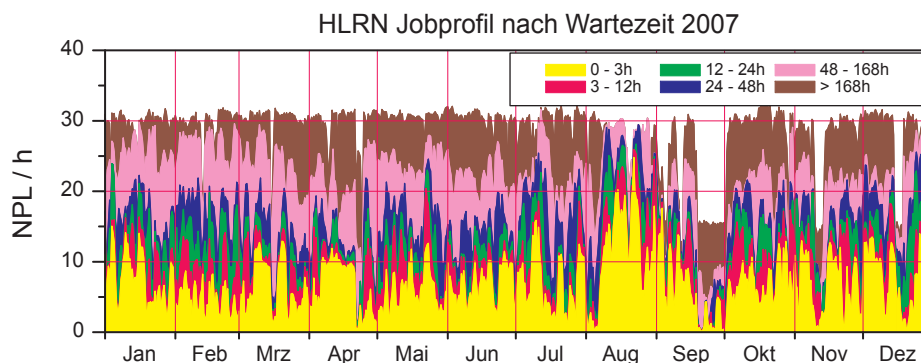


ABBILDUNG 4.1: Wartezeiten bis zum Beginn der Jobausführung.

Die überwiegende Anzahl der bearbeiteten Aufträge fordert eine Laufzeit zwischen 24 und 48 h an; näheres kann der Abbildung 4.2 entnommen werden.

Bei der Betreuung dieses verteilten Systems durch Mitarbeiter an unterschiedlichen Standorten liegen die Schwerpunkte weiterhin neben dem eigentlichen Betrieb auch in der Erstellung einer weborientierten Benutzerdokumentation <http://www.hlrn.de/doc/>, der intensiven Beratung der Benutzer durch Experten der jeweiligen Fachrichtung und einer automatisch erstellten weborientierten Informa-

²NPL – Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

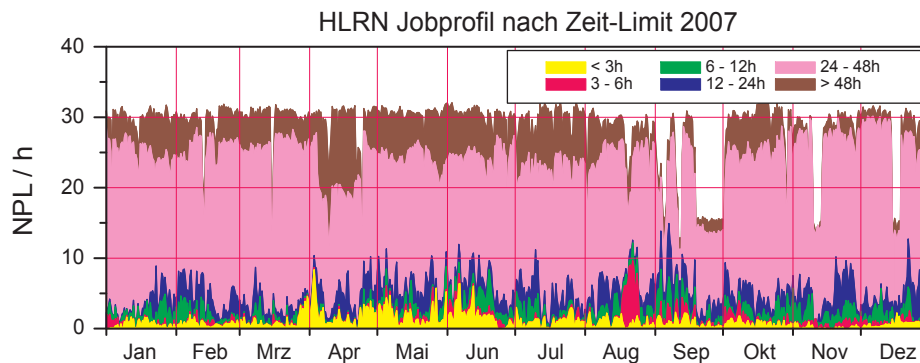


ABBILDUNG 4.2: Nutzung nach der angeforderten Ausführungszeit.

tion über den Status des Systems einschließlich seiner wichtigsten Komponenten <http://www.hlrn.de/status/>.

Während des Berichtszeitraums haben Mitarbeiter des ZIB an der Universität Bremen, an der Technischen Universität Berlin und im ZIB wieder gut besuchte Lehrveranstaltungen bzw. Ausbildungskurse „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ durchgeführt.

Das Konzept der Verteilung des HLRN-Systems auf zwei Standorte, verbunden durch den dedizierten HLRN-Link, hat sich bewährt und wird bis zum Ende der Betriebszeit des Systems HLRN-I (voraussichtlich im 3. Quartal 2008) beibehalten und mit Einführung des neuen Systems HLRN-II fortgesetzt.

Die Software-Ausstattung des Systems HLRN-I hat sich im Berichtszeitraum nicht mehr geändert; eine entsprechende Auflistung kann dem Jahresbericht 2006 entnommen werden.

4.1.2 Nachfolgebeschaffung HLRN-II

Supercomputer der höchsten Leistungsklasse gelten bereits nach wenigen Jahren Betriebszeit als veraltet und können sowohl aus Leistungs- als auch Kapazitätsgründen nicht mehr im ursprünglich vorgesehenen Sinne für anspruchsvolle wissenschaftliche Anwendungen eingesetzt werden. Die zuständigen Gremien des HLRN-Verbunds – der Verwaltungsrat, die Technische Kommission und der Wissenschaftliche Ausschuß – haben sich daher bereits sehr frühzeitig verständigt, den vorhandenen HLRN-I-Rechner durch ein leistungsfähigeres System (HLRN-II) zu ersetzen. Das Konzept zur Beschaffung des Nachfolgesystems HLRN-II wurde in den Jahren 2005/06 dem Wissenschaftsrat und der Deutschen Forschungsgemeinschaft vorgestellt und von beiden Einrichtungen zur Beschaffung empfohlen. Wegen der Föderalismusreform konnte das Finanzierungskonzept erst



ABBILDUNG 4.3: Feierliche Unterzeichnung des HLRN-II-Vertrages am 19.12.2007: H. Thieme (ZIB), P. Deuffhard (ZIB), A. Reinefeld (ZIB), H.-G. Husung (StS WissForsch Berlin), M. Mautrich (SenBWF Berlin), T. Weselowski (SGI), R. Übelmesser (SGI).

Anfang 2007 endgültig festgelegt werden. Im März 2007 erfolgte dann eine europaweite Ausschreibung (Verhandlungsverfahren mit vorgeschalteter öffentlicher Bekanntmachung gemäß VOL/A). Von den eingegangenen Angeboten namhafter Supercomputer-Hersteller wurde in mehreren aufwendigen Verhandlungsrunden, an denen die Vertreter der Technischen Kommission, des Verwaltungsrates und des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN-Verbunds beteiligt waren, schließlich das Angebot der Firma SGI ausgewählt und der Zuschlag erteilt. Am 19. Dezember 2007 fand unter Beisein des Berliner Staatssekretärs für Wissenschaft und Forschung, Dr. Hans-Gerhard Husung, die Vertragsunterzeichnung statt (siehe Abbildung 4.3).

In seiner Endausbaustufe im Jahre 2009 wird das neue HLRN-II-System etwa die sechzigfache Leistung des HLRN-I besitzen. Es verfügt über 24.832 Prozessoren mit einer Spitzenleistung von insgesamt 312 TFlop/s und 92 TByte Hauptspeicher sowie 1620 TByte Plattenspeicher. Die Leistungsspezifikationen eines Teilsystems (ZIB) und Installationszeitpunkte können Tabelle 4.1 entnommen werden.

Mit dem Betriebsbeginn ist im zweiten Quartal 2008 zu rechnen; Systemerweiterungen finden Ende 2008 bzw. im dritten Quartal 2009 statt. Das bewährte

	SGI ICE 8200 Plus	SGI Altix XE250
Installationstermin	Q2/08	Q2/08
CPU-Typ	Intel Harpertown	Intel Harpertown
Anzahl Knoten	320	44
Anzahl Cores	2560	352
Hauptspeicher/Knoten	16 GB	64 GB
Hauptspeicher	5,12 TB	2,816 TB
Spitzenrechenleistung	30,72 TFlop/s	4,2 TFlop/s
Netzwerk	IB 4xDDR + IO netw.	IB 4xDDR + IO netw.
	SGI Carlsbad 2	SGI Ultra Violet
Installationstermin	Q4/08	Q3/09
CPU-Typ	Intel Gainestown	Intel Beckton
Anzahl Knoten	916	5
Anzahl Cores	7328	4 x 512 + 1 x 128
Hauptspeicher/Knoten	32 GB	2048 bzw. 512 GB
Hauptspeicher	29,312 TB	8,704 TB
Spitzenrechenleistung	99,7 TFlop/s	19,1 TFlop/s
Netzwerk	IB QDR + IO netw.	NumaLink5

Tabelle 4.1: HLRN-II Systemdaten (Teilsystem ZIB).

Konzept der symmetrisch ausgestatteten Standorte am ZIB (Berlin) und RRZN (Hannover) wird auch im HLRN-II beibehalten.

4.1.3 Wissenschaftlicher Ausschuss – ausgewählte Großprojekte

Wissenschaftlicher Ausschuss – ausgewählte Großprojekte

Der vom Verwaltungsrat des HLRN eingesetzte Wissenschaftliche Ausschuss besteht aus elf Wissenschaftlern, die auf den relevanten Gebieten des HPC fachlich ausgewiesen sind; es sind alle am HLRN-Verbund beteiligten Bundesländer vertreten. Der Ausschuss bewertet die wissenschaftliche Relevanz jedes Forschungsvorhabens mit erheblichem Ressourcenbedarf (Großprojekt) und die Eignung der Aufgabenstellung für die Lösung mit Hochleistungsrechnern. Auf der Grundlage dieser Bewertung, des begründeten Ressourcenbedarfes und der im HLRN verfügbaren Hochleistungsrechenkapazität teilt der Ausschuss Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Der Ausschuss hat nach seiner Konstituierung unter dem Vorsitz von Volkard Linke (FU Berlin) erstmalig im Februar 2003 über die Vergabe von Kontingenten an Großprojekte entschieden und tagt seitdem quartalsweise.

Großprojekte

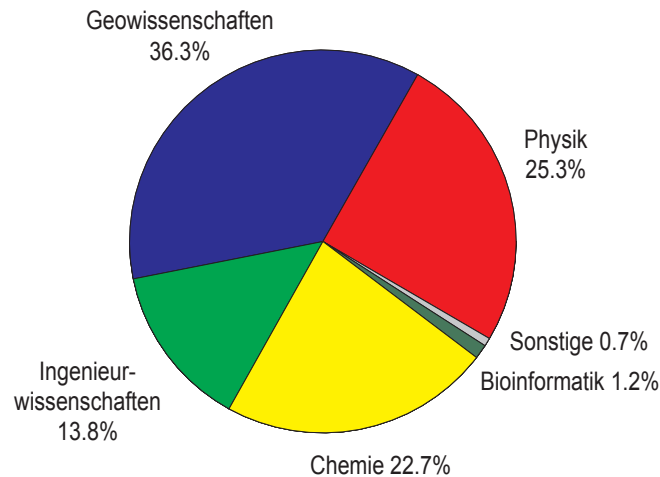


ABBILDUNG 4.4: Nutzung des HLRN-Systems im Jahr 2007 nach Fachgebieten.

Das HLRN-System wurde im Berichtszeitraum von 82 Großprojekten – insbesondere aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie, Bioinformatik sowie Geowissenschaften – genutzt. Die Anteile der Fachgebiete an der insgesamt abgegebenen Leistung sind in Abbildung 4.4 aufgeführt. Im Vergleich zum Vorjahr haben Projekte aus dem Bereich Klimawissenschaften stark an Bedeutung gewonnen. Der Gesamtbedarf übersteigt die vorhandene Rechenkapazität um ein Vielfaches. Das Antragsvolumen beträgt regelmäßig das Dreifache der verfügbaren Kapazität.

Die folgenden zehn größten Projekte haben auf dem HLRN-Rechner in den Quartalen 1/2007 bis 4/2007 insgesamt ca. 121.000 NPL³ in Anspruch genommen; das entspricht etwa der Hälfte der gesamten im betreffenden Zeitraum verbrauchten Rechenkapazität:

- Physik: *QCD with 2+1 Dynamical Flavours and Chiral Valence Quarks*, Freie Universität Berlin, 22.783 NPL.
- Geowissenschaften: *Simulation of Past, Present, and Future Climates*, Christian-Albrechts-Universität Kiel, 19.545 NPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 14.358 NPL.

³NPL – Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

- Geowissenschaften: *Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY*, Universität Bremen, 13.634 NPL.
- Geowissenschaften: *Skalenanalysen von Stratocumulus- und Cumuluswolken in Grobstruktursimulationen der Wolkenbildung*, Leibniz-Universität Hannover, 10.769 NPL.
- Geowissenschaften: *Entwicklung und Validierung von Footprintmodellen für homogenes und inhomogenes Gelände mit Hilfe von hochauflösenden Grobstruktursimulationen*, Leibniz-Universität Hannover, 10.697 NPL.
- Physik: *Der Infrarotlimes in der Gitter-QCD*, Humboldt-Universität zu Berlin, 8.419 NPL.
- Physik: *Dynamik stark korrelierter Elektronen bei tiefen Temperaturen*, Universität Göttingen, 7.227 NPL.
- Chemie: *Molekulardynamische Untersuchungen zur Struktur und Funktion der Glycocalix*, Christian-Albrechts-Universität Kiel, 7.147 NPL.
- Chemie: *Modelling relevant systems in heterogeneous catalysis: Metal and oxide aggregates on oxide supports*, Humboldt-Universität zu Berlin, 6.597 NPL.

Im Folgenden werden die oben aufgeführten Großprojekte vorgestellt. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektarbeitern verfasst worden.

QCD with 2 + 1 Dynamical Flavours and Chiral Valence Quarks

Verantwortlicher Wissenschaftler: Volkard Linke, Volker Weinberg, Freie Universität Berlin

As part of the Standard Model of elementary particle physics, Quantum Chromodynamics (QCD) describes the strong interactions of quarks and gluons. Its structure sets an intrinsic scale Λ_{QCD} . Three out of six quark flavours are light with respect to Λ_{QCD} . The u - and d -quarks are extremely light (below 10 MeV), whereas the s -quark has a mass around 110 MeV. Of course the lightest quarks dominate our everyday's world, but in many respects the impact of the s -quark is non-negligible.

The standard method for a non-perturbative study of QCD is based on the lattice regularisation and Monte Carlo simulations. The first simulations of QCD were performed in the quenched approximation, which is computationally cheap, but it yields an uncontrolled systematic error. More recently, an increasing number of simulations with dynamical fermions have been performed. Still, another limitation was due to the conceptual difficulty to keep track of the approximate chiral symmetry of the light quarks.

The treatment of chiral symmetry on the lattice is now enabled by new theoretical developments. However, its practical application is tedious so that QCD results with chiral fermions are essentially still restricted to quenched simulations. In this

project these developments are optimally combined in the framework of computational resources available in the near future. First, traditional Wilson fermions with a clover term are simulated on supercomputers in Jülich and Munich. The dynamically generated configurations are then analysed with the overlap Dirac operator at the HLRN machines. The overlap operator provides a formulation of chiral lattice fermions in a closed form.

Topics of the calculations carried out at HLRN are the anomalous magnetic moment of the muon, the measurement of the strange quark content of the nucleons, the impact of the s -quark on chiral symmetry breaking and on weak matrix elements, the application of the Operator Product Expansion on the lattice, the electric dipole moment of the neutron, and topological structure as determined by the overlap operator.

Simulation of Past, Present, and Future Climates

Verantwortliche Wissenschaftler: Mojib Latif, Noel Keenlyside, Institut für Meereskunde, Christian-Albrechts-Universität Kiel

A hierarchy of climate models is used to perform simulations of past, present, and future climates with the overall aim to better understand the mechanisms for climate variability, and the limits of predictability. The pronounced decadal to multi-decadal variability of the North-Atlantic-European sector is the focus of this work. In a suite of carefully constructed experiments the origins of this variability, its robustness, and its predictability will be investigated.

ENSEMBLES (EU): Among its goals is the development of a multi-model prediction system for seasonal to decadal time scales. Our participation involves the performance of decadal retrospective forecasts and to study the predictability on decadal timescales in the North-Atlantic-European sector.

AMMA (EU): This project aims to provide the African decision makers with improved assessments of similar rainfall changes which are likely to occur during the 21st century due to natural fluctuations and as a result of anticipated global climate change. Our participation involves understanding seasonal to decadal variability of African monsoon system.

DYNAMITE (EU): This project is on understanding the dynamics of the coupled climate system. Under this project we will perform atmospheric timeslice experiments at high (T106) resolution for present and future climate conditions.

NORDATLANTIK (BMBF): The overall objective of the project is to specify an observational and diagnostics system capable of determining the impact of large scale variability on regions of the North Atlantic, its adjacent seas, and the European continent itself. The intention is to improve the qualitative and quantitative prediction capabilities of application-relevant models. Our participation will involve improving seasonal prediction capabilities in the Atlantic and studying the stability of the THC.

Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen

Verantwortliche Wissenschaftler: Joachim Sauer, Christian Tuma, HU Berlin

Die Simulation heterogen-katalytischer Prozesse erfordert Kenntnisse über Elementarreaktionen. Dazu gehören Übergangsstrukturen, Reaktionsenergien, Energiebarrieren und Geschwindigkeitskonstanten.

Die Größe der Elementarzelle und die große Zahl von Atomen in der Elementarzelle erschwert die Berechnung mit quantenchemischen Methoden für Elementarreaktionen in Zeolithen.

Die QM/MM-Hybridmethode der Antragsteller soll zu einer QM/QM-Methode weiterentwickelt und benutzt werden, um im Rahmen der Theorie des Übergangszustandes Energiebarrieren und Geschwindigkeitskonstanten für Reaktionen (z. B. Protonensprünge oder Umwandlung von Kohlenwasserstoffen) in verschiedenen Zeolith-Umgebungen abzuschätzen.

Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY

Verantwortlicher Wissenschaftler: Marco Vountas, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

Hintergrund für dieses Projekt sind die Messungen des SCIAMACHY-Instrumentes (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography⁴), das weltweit erstmals weltraumgestützt die Erdatmosphäre abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie abtastet⁵. Diese technische Besonderheit wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhengauflösung und Verteilung verschiedener Spurengase zu bestimmen (auch in der Troposphäre), die für eine ganze Reihe wissenschaftlicher Fragestellungen von besonderer Bedeutung sind. Insbesondere die Erfassung und Überwachung troposphärischer Brommonoxid- und Stickstoffdioxid-Konzentrationen eröffnet neue Möglichkeiten im Bereich Umweltmonitoring. Die Datenprodukte dienen der flächendeckenden und dauerhaften Überwachung von industriellen Emissionen und Biomassenverbrennung. Die resultierenden Datenprodukte liefern einen entscheidenden Beitrag zum Umweltmonitoring und sind in dieser Güte bisher nicht systematisch erstellt worden.

Bis zum heutigen Zeitpunkt sind noch keine offiziellen Profilprodukte von den Agenturen freigegeben worden. Es wird nicht erwartet, daß diese im gegenwärtigen Projektzeitraum freigegeben werden.

Die bereitgestellte Rechenleistung dient der langfristigen Erstellung von globalen Spurengaskarten und Profilen und soll damit die noch vorhandene Lücke in der Verfügbarkeit von höherrangigen SCIAMACHY-Datenprodukten schließen.

⁴<http://www.sciamachy.de>

⁵ <http://www.iup.physik.uni-bremen.de/sciamachy/publication.html>

Neben der projektspezifischen Bereitstellung von Daten dient das Projekt daher vor allem der wissenschaftlichen Gemeinde, die auf diese Weise mit den zur Zeit einzigen systematisch berechneten Profildaten versorgt wird.

Skalenanalysen von Stratocumulus- und Cumuluswolken in Grobstruktursimulationen der Wolkenbildung

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dieter Etling, Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover

In diesem Projekt soll ein neues Subskalenmodell (im Rahmen der sogenannten Superparametrisierung) zur Wolkenbildung für numerische Wettervorhersagemodelle entwickelt werden. Für die analytischen Arbeiten der sogenannten Multiskalenanalysen werden Skalenanalysen von Wolkenfeldern benötigt. Neben Satellitendaten sollen mittels Grobstruktursimulation modellierte Wolken analysiert werden. Der Vorteile gegenüber Satellitendaten sind die hohe Auflösung von einigen Dekametern und die dreidimensionale Information sowohl über die Wolken als auch über die Strömung.

Entwicklung und Validierung von Footprintmodellen für homogenes und inhomogenes Gelände mit Hilfe von hochauflösenden Grobstruktursimulationen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Siegfried Raasch, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz-Universität Hannover

Footprintmodelle bestimmen den räumlichen Zusammenhang der Messung eines Flusses oder einer Konzentration, indem sie die Transferfunktion zwischen den Quellen und Senken eines Signals und der Position des Mess-Sensors definieren. Sie werden zunehmend zur Planung von Messungen in Feldexperimenten und als Maßnahme zur Qualitätssicherung mikrometeorologischer Messungen eingesetzt.

Dieses Projekt zielt auf die Entwicklung und Validierung von Methoden ab, mit denen Footprints über thermisch und aerodynamisch heterogenen Oberflächen bestimmt werden können. Darüber hinaus sollen die vom Grobstruktursimulationsmodell generierten Daten zur Entwicklung und Validierung von verbesserten Parametrisierungen verwendet werden. Dazu soll in das seit 1997 am Institut für Meteorologie und Klimatologie fortlaufend weiterentwickelte Grobstruktursimulationsmodell PALM⁶ ein Lagrangesches Partikel-Dispersionsmodell integriert werden.

Zur abschließenden Einordnung der mit dem Grobstruktursimulationsmodell und mit dem Lagrangeschen Footprintmodell erhaltenen Footprints soll schließlich für einige der wenigen Fälle, in denen bereits entsprechende Daten aus Feldexperimenten vorliegen und zu denen die mit uns kooperierende Arbeitsgruppe von der

⁶http://www.muk.uni-hannover.de/~raasch/PALM_group/

Universität Bayreuth Zugang hat, eine Validierung der Modellergebnisse anhand der Daten aus diesen Experimenten erfolgen.

Der Infrarotlimes in der Gitter-QCD

Verantwortlicher Wissenschaftler: Michael Müller-Preussker, Humboldt-Universität zu Berlin

Das Phänomen des Eingeschlossenseins der Quarks in Hadronen („Confinement“) in der Quantenchromodynamik ist nach Gribov und Zwanziger eng mit dem Infrarotverhalten der eichvarianten Gluon- und Ghost-Propagatoren im Impulsraum verknüpft. Deren Berechnung verlangt nicht-störungstheoretische Methoden. In der Literatur werden dazu einerseits begrenzte Systeme von Dyson-Schwinger-Gleichungen (DSG) gelöst und andererseits Gitter-Simulationsrechnungen durchgeführt. Der Berechnung liegt in der Regel die Landau- oder Coulomb-Eichung für die Gluonfelder zugrunde. Dabei ist ein entsprechendes Eichfunktional zu maximieren, das aber in der Regel eine Vielzahl von lokalen Extrema besitzt (Gribov-Problem). Die Konsistenz der Aussagen beider theoretischer Zugänge ist ein grundsätzliches Anliegen, zumal die gewonnenen Greenschen Funktionen als Input für die Phänomenologie der Hadronen wichtig sind.

Jüngste Untersuchungen haben gezeigt, dass sich Lösungen der DSG auf einem Torus ähnlich verhalten wie die der Gitter-Rechnungen. Sie zeigen aber auch große Effekte endlichen Volumens mit der Konsequenz einer sehr langsamen Konvergenz zum thermodynamischen Limes. In diesem Projekt werden einerseits diese Volumeneffekte im Zusammenhang mit dem Problem der Gribov-Kopien untersucht. Andererseits werden auf großen Gittern bislang nicht berechnete Greensche Funktionen, insbesondere der Quark-Propagator und verschiedene Vertex-Funktionen, aus Monte-Carlo-Simulationen bestimmt, um daraus im Vergleich mit störungstheoretischen Resultaten die laufende QCD-Kopplung auf alternative Weise zu bestimmen.

Unsere Gitterrechnungen in der reinen $SU(3)$ -Eichtheorie, aber auch in der vollen QCD mit zwei Quark-Flavours haben, was die Gluon- und Ghost-Propagatoren betrifft, den *State of the art* wesentlich mitbestimmt ⁷ Dies wurde durch Ausdehnung unserer Simulationen auf Gitter der Größe 80^4 ermöglicht, was einer linearen Box-Größe von bis zu 13 fm und Impulsen bis hinunter zu 0,1 GeV entspricht.

⁷ I. L. Bogolubsky, E. M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, and A. Sternbeck, PoS Lattice 2007, 290 (2007).

I. L. Bogolubsky, V. G. Bornyakov, G. Burgio, E. M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, P. Schemel, and V. K. Mitrjushkin, PoS Lattice 2007, 318 (2007).

A. Sternbeck, K. K. Maltman, L. von Smekal, A. G. Williams, E. M. Ilgenfritz, and M. Müller-Preussker, PoS Lattice 2007, 256 (2007).

Dynamik stark korrelierter Elektronen bei tiefen Temperaturen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Thomas Pruschke, Universität Göttingen

Die Berechnung dynamischer Eigenschaften von stark korrelierten Elektronensystemen ist sowohl aus Sicht der Anwendung als auch der Grundlagenforschung ein Forschungsgebiet von höchstem aktuellen Interesse. Phänomene wie Quanten- und klassische Phasenübergänge, magnetokalorischer Effekt, Metall-Isolator-Übergang oder auch kolossaler Magnetwiderstand, wie sie z. B. im Bereich der Übergangsmetallverbindungen beobachtet werden, sind weitgehend unverstanden und stellen an die theoretischen Methoden eine große Herausforderung.

Neben wenigen analytischen Verfahren sind es für diese Systeme insbesondere die auf Höchstleistungsrechner angewiesenen numerischen Methoden, die ein verlässliches Studium von Eigenschaften und die teilweise quantitative Berechnung physikalischer Meßgrößen ermöglichen. Konkret wurden in der Antragsperiode 2007 primär zwei Typen von Rechnungen durchgeführt. Einerseits wurden Quantenstörstellenmodelle mit Hilfe der numerischen Renormierungsgruppe untersucht. Diese Systeme erlauben das Studium der Niederenergiephysik und von Phasenübergängen in korrelierten Elektronensystemen mittels der dynamischen Molekularfeldtheorie⁸. Unsere Untersuchungen zeigen, dass sich z. B. abhängig von den Details der atomaren elektronischen Struktur sehr komplexe magnetische Phasendiagramme ergeben⁸. Da in der dynamischen Molekularfeldtheorie nicht-lokale Fluktuationen nicht berücksichtigt werden können, wurde andererseits die Thermodynamik von Heisenberg- und Hubbard-Modellen mit Hilfe von vollständiger Matrix-Diagonalisierung berechnet⁹. Aufgrund von konkurrierenden Wechselwirkungen können hier interessante Phänomene wie z. B. Nullpunksentropie auftreten, die dann zu eventuell auch technologisch relevanten Effekten in der Thermodynamik führen.

Wichtig für den Erfolg dieser Untersuchungen war nicht nur die großzügige Zuteilung von Rechenzeit, sondern, besonders beim zweiten Themenkomplex, die Möglichkeit, dass am HLRN bis zu 200 GByte Hauptspeicher im SMP-Betrieb effizient angesprochen werden konnten¹⁰. Die benutzten Programme sind in dieser Hinsicht hochoptimiert und zeigen ein hervorragendes Skalierungsverhalten im SMP-Betrieb.

⁸R. Peters and T. Pruschke, *Magnetic phases in the correlated Kondo-lattice model*, Phys. Rev. B **76**, 245101 (2007)

⁹O. Derzhko, A. Honecker, and J. Richter, *Low-Temperature Thermodynamics for a Flat-Band Ferromagnet: Rigorous versus Numerical Results*, Phys. Rev. B **76**, 220402(R) (2007).

¹⁰A. Honecker and J. Schüle, *OpenMP Implementation of the Householder Reduction for Large Complex Hermitian Eigenvalue Problems*, pp. 271–278 in NIC Series Volume 38: *Parallel Computing: Architectures, Algorithms and Applications*, Jülich (2007).

Molekulardynamische Untersuchungen zur Struktur und Funktion der Glycocalix

Verantwortliche Wissenschaftler: Bodo Hartke, Mats Eriksson, Christian-Albrechts-Universität Kiel

An der Oberfläche aller eukaryontischer Zellen befindet sich die Glycocalix, ein dichter Mantel vielfältiger Oligosaccharidstrukturen, die in die extrazelluläre Flüssigkeit ragen. Die Funktionen dieses komplexen Gebildes gehen weit über den eines physikalischen Schutzmantels hinaus; seine zentrale Rolle bei zellulären Erkennungs- und Kommunikationsprozessen, bis hin zu Autoimmunerkrankungen, Krebs, AIDS und bakteriellen Infektionen, ist belegt. Die Wechselwirkung der Glycocalix mit kohlenhydrat-erkennenden Proteinen (Lektinen) scheint jedoch nicht nach den bekannten Schlüssel-Schloss-Prinzipien der Protein-Biochemie zu erfolgen, sondern größere Bereiche mehrerer Kohlenhydrateinheiten zu umfassen. Sie sind daher noch weitgehend unverstanden, ebenso wie die Details des strukturellen Aufbaus der Glycocalix und die dabei möglicherweise entscheidende Rolle des Umgebungswassers. Wegen der Komplexität des Gesamtsystems sind experimentelle Zugänge sehr schwierig und ihre Interpretationen problematisch.

In diesem Projekt wollen wir daher mit Standard-Molekulardynamikpaketen (am HLRN mit NAMD) komplexer werdende Kohlenhydratstrukturen untersuchen, mit dem Fernziel, das Verständnis der Glycocalix zu verbessern. Dabei haben wir zunächst die Auswirkungen von mehreren benachbarten Oligosacchariden aufeinander und auf das sie einbettende Wasser und darin gelöste einfache Ionen untersucht. Dabei zeigte sich eine ungewöhnlich hohe konformationelle Flexibilität der von uns ausgewählten, glycocalix-typischen Oligosaccharidbausteine. Gleichzeitig beeinflussen diese Oligosaccharide in ihrer direkten Umgebung die Ionen-Solvatationseigenschaften des Wassers, jedoch in anderer Weise als andere Biomoleküle (Proteine, DNA). Für all diese Effekte spielt es auch eine Rolle, ob ein einzelnes Oligosaccharid oder mehrere in enger Nachbarschaft betrachtet werden.

Modelling relevant systems in heterogeneous catalysis: Metal and oxide aggregates on oxide supports

Verantwortliche Wissenschaftler: M. Verónica Ganduglia-Pirovano, HU Berlin

As the material and pressure gaps between real catalysis and traditional surface science are narrowing, experiments and modelling that straddle both sides of the gap appear essential for the understanding of heterogeneous catalysis and the rational design of catalysts. Producing well defined model systems that reproduce practical supported oxide catalysts, such as vanadia, is challenging because of the complexity of the real systems (e.g. possible multiple oxidation states, variable local coordination, etc). Moreover, the catalytic performance in oxidation cata-

lysis that is related to the surface reducibility, depends on the specific support. We combine quantum mechanical calculations with statistical thermodynamics to identify the stable model supported catalysts under relevant conditions (varying temperature, oxygen and water partial pressure and vanadium activity). Calculations are performed using the VASP simulation package. The simulation of core-level shifts, vibrational spectra and scanning tunnelling spectroscopy images allow the interpretation of experimental data, and the validation of the 'in-situ' theoretical modelling. Our ultimate goal is the determination of the detailed reaction paths connecting reactants and products of elementary reaction steps of important reactions, and the elucidation of the effect of the support.

4.1.4 Fachberatung

Das vor vielen Jahren am ZIB eingeführte Konzept der HPC-Fachberatung hat sich uneingeschränkt bewährt. Jedem vom Wissenschaftlichen Ausschuss empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des HLRN zugeordnet; die Fachberater des ZIB sind in Tabelle 4.2 aufgeführt.

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
Chemie	Bernd Kallies
Bioinformatik	Thomas Steinke
Ingenieurwissenschaften	Wolfgang Baumann
Physik	Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Massendatenhaltung, Archivierung	Manfred Stolle

Tabelle 4.2: Fachberater im ZIB.

Die Fachberater des ZIB koordinieren, unterstützt insbesondere durch das RRZN in Hannover, den HLRN-Support und führen regelmäßige Treffen zur gegenseitigen Information und Ausbildung der norddeutschen Fachberater und Anwenderbetreuer aus den Universitätsrechenzentren der am HLRN beteiligten Länder durch.

Die Arbeit der Fachberater des HLRN am ZIB umfasst neben der Betreuung von Großprojekten und Nutzern in den letzten Jahren insbesondere wegen der angespannten Personalsituation im Bereich der Systemverwaltung zunehmend auch systemnahe Aufgaben.

Die wichtigsten Arbeitsbereiche der Fachberater sind

- konzeptionelle Einflussnahme auf Systemkonfigurationen aus Anwendersicht
- Erstellung und Pflege der Dokumentation der Systemnutzung

- fachspezifische Beratung zur effizienten Nutzung der HLRN-Systeme
- Installation und Pflege von Anwendersoftware unabhängiger Softwarehersteller
- Mitarbeit bei der Anpassung und Optimierung nutzereigener Software
- Hilfestellung bei der Stellung von Projektanträgen
- Durchführung von Schulungen und Workshops zur Weiterbildung der HLRN-Nutzerschaft
- Durchführung von Lehrveranstaltungen insbesondere zu Themen des Hochleistungsrechnens an Hochschulen
- Administration ausgewählter nutzernahe Dienste (HLRN-Mailservers, Trouble-Ticket-System, News-System)
- Administration des Batchsystems
- fachliche Mitarbeit in einzelnen Großprojekten

Im Berichtsjahr war die Tätigkeit der Fachberater des ZIB geprägt durch die Vorbereitung und aktive Teilnahme an der Beschaffung des HLRN-II-Systems. Hervorzuheben sind

- Definition von Benchmarks zur Leistungsmessung
- Erstellung des Leistungsverzeichnisses, Definition der Bewertungsrichtlinien
- laufende Auswertung der Angebote und deren Verbesserungen im Laufe des Verhandlungsverfahrens
- Teilnahme an Verhandlungen

Um eine effiziente Inbetriebnahme des HLRN-II-Systems im Frühjahr 2008 vorzubereiten, wurden durch die ZIB-Fachberater bereits im Berichtsjahr vor Vertragsabschluss folgende Aktivitäten unternommen:

- Konzeption und Inbetriebnahme eines neuen Dokumentationssystems auf Wiki-Basis
- Konzeption und Evaluierung eines neuen Systems zur Projekt- und Kontingentverwaltung

4.1.5 Cluster-System für Grid-Projekte

Zum Jahresende 2007 konnte der 2006 aus BMBF-Mitteln am ZIB installierte Rechen-Cluster durch eine erneute D-Grid-Sonderinvestition, s. <http://www.d-grid.de>, wesentlich erweitert werden, so dass nun 80 Rechenknoten mit insgesamt 480 Prozessorkernen und 960 GByte Hauptspeicher bei einer Spitzenleistung von 5 TFlop/s zur Verfügung stehen:

- Zu den bestehenden 40 Rechenknoten mit jeweils 2x Dual-Core Intel Xeon „Woodcrest“ Prozessoren, 8 GB Hauptspeicher, sind 40 neue Knoten mit jeweils zwei Quad-Core Intel Xeon „Harpertown“, 16 GB Hauptspeicher, dazugekommen.
- Außerdem wurden sechs neue Power Edge Server sowie weitere spezielle Hardware für eine leistungsfähige Integration des parallelen Dateisystems Lustre beschafft.
- Zum Ausbau der einzelnen Grid-Dienste und zur Verbesserung von Monitoring und Systemverwaltung wurden vier zusätzliche Power Edge Server installiert, so dass alle wesentlichen Dienste auf dedizierten Maschinen laufen.
- Die neuen Hardwarekomponenten und der bereits vorhandene Login-Knoten kommunizieren über Infiniband. Zentrales Element ist hier ein leistungsstarker Cisco-Switch. Bei der Kommunikation über Infiniband liegt die Latenzzeit etwa bei ca. 4 μ s und die Bandbreite bei 1.200 MByte/s.
- Als Speicherplatz wurden zusätzliche 250 Terabyte im SAN angeschafft.

Der Cluster ist nun zu einem leistungsfähigen Gesamtsystem für die wissenschaftliche Forschung geworden und füllt vier Racks in der Rechnerhalle des ZIB (davon zwei Racks durch die Erweiterung). Alle entscheidenden Dienste werden mit ausfallsicherer Stromversorgung betrieben. Die sechs Lustre-Server bilden drei Paare, wobei jeweils ein Rechner bei Ausfall seines Partners die volle Funktionalität alleine übernehmen kann. Auch die entscheidenden Grid-Dienste sollen künftig von jeweils zwei Rechnern ausfallsicher zur Verfügung gestellt werden. Zur Reduzierung der Kabelverbindungen zwischen den Racks wurden die Ethernet-Switches auf die Doppelracks verteilt und paarweise durch den Unterboden zu jeweils einem logisch zusammengehörigen Switch verbunden („stacked“) (Abbildung 4.5 zeigt die Verteilung der Hardware auf die Racks und die Vernetzung der einzelnen Komponenten).

Die Server werden mit dem Betriebssystem „Suse Linux Enterprise Server 10“ betrieben, die Rechenknoten unter Open Suse 10.3. Zur Benutzung des Clusters werden entweder spezielle Grid-Dienste über die in den entsprechenden Communities bekannten Internet-Adressen angesprochen oder zugelassene Benutzer melden sich mit einer vom ZIB eingerichteten Kennung auf dem Login-Knoten an. Die Prozesse auf dem Cluster werden durch ein Batch-System verwaltet, zu dem der Benutzer Jobs vom Login-Knoten aus oder direkt über das Grid abschicken kann. Benutzt wird der Cluster aus allen Bereichen des D-Grids (zu Details zu den D-Grid-Projekten s. Kap. 2.2 dieses Jahresberichtes). Weitergehende Benutzerinformationen zum Cluster sind <http://www.zib.de/cluster-user/view> zu entnehmen.



ABBILDUNG 4.5: Grid-Cluster.

4.2 Das Berliner Wissenschaftsnetzwerk BRAIN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Marek Fröhlich, Ursula Droebe

Kooperationspartner: Rechenzentren von FU, HU und TU Berlin

Förderung: Land Berlin

Seit 1994 wird das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN¹¹ von den Hochschulen, Forschungsinstituten und Bildungseinrichtungen sowie anderen öffentlichen Einrichtungen in Berlin als Hochgeschwindigkeitsdatennetz genutzt. Planungs- und Steuerungsorgan für BRAIN ist die von der Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung (vormals Wissenschaft, Forschung und Kultur) eingerichtete BRAIN-Planungsgruppe. Sie besteht aus Mitarbeitern der Rechenzentren der drei Berliner Universitäten und des ZIB. Nach außen wird BRAIN in rechtlicher und wirtschaftlicher Hinsicht treuhänderisch vom ZIB vertreten, die BRAIN-Geschäftsstelle befindet sich ebenfalls im ZIB.

¹¹BRAIN – Berlin Research Area Information Network

BRAIN-Leitungsnetz

In enger Zusammenarbeit der Wissenschaftseinrichtungen mit dem IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ), der für die Behörden Berlins zuständigen Einrichtung, wurde seit 1993 ein landeseigenes Glasfasernetz mit einer derzeitigen Länge von 856 km Glasfaserkabel (je Kabel bis zu 144 Einzelfasern) zur gemeinsamen Nutzung von Wissenschaft und Verwaltung errichtet und weiter ausgebaut. Aktuell nutzt BRAIN vom landeseigenen Glasfasernetz 2.100 km Einzelfasern und verbindet insgesamt 43 Einrichtungen (BRAIN-Teilnehmer und DFN-Anwender) aus Wissenschaft, Bildung und Kultur mit 129 Standorten.

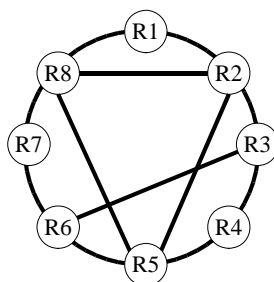
2007 wurde in Zusammenarbeit mit BRAIN das LWL-Netz des Landes Berlin durch Anschluss folgender Standorte (Baumaßnahmen) erweitert:

- Charité: Standorte Hindenburgdamm, Turmstraße, Reinickendorfer Straße
- Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung (DIW): Standort Mohrenstraße
- Zentral- und Landesbibliothek Berlin (ZLB): Amerika Gedenkbibliothek, Berliner Stadtbibliothek und Senatsbibliothek

BRAIN-Dienste

Das Glasfasernetz von BRAIN wird im Wesentlichen für folgende Dienste genutzt:

- BRAIN-Verbundnetz: Metro-Netz-Betrieb in Gigabit-Ethernet-Technik mit zentralem Netzwerkmanagement. Alle am BRAIN-Verbundnetz angeschlossenen Einrichtungen können über ihren Anschluss Daten über IP mit anderen Verbundnetz-Teilnehmern austauschen. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, ein (mehrere) VLAN(s) einer Einrichtung zu einem Standort einer anderen Einrichtung durch das Kernnetz zu schalten. Ein ringförmiges Kernnetz mit zusätzlichen Querverbindungen zwischen den acht eingesetzten Netzknoten sorgt für Redundanz im Leitungsnetz (Abbildung 4.6).



- R1: Charité, Campus Virchow Klinikum
- R2: HU - Humboldt-Universität zu Berlin (Mitte)
- R3: FHTW - Fachhochschule für Technik und Wirtschaft
- R4: WIAS - Weierstraß Institut für angewandte Analysis und Stochastik
- R5: SPK - Stiftung Preußischer Kulturbesitz / Staatsbibliothek Haus 2
- R6: WISTA - Wissenschafts- und Technologiepark Adlershof
- R7: ZIB - Zuse-Institut Berlin
- R8: TU - Technische Universität Berlin (tubIT)

ABBILDUNG 4.6: BRAIN-Verbundnetz: Kernnetz mit acht Routern.

Von den derzeit 27 BRAIN-Teilnehmern nutzen 24 Einrichtungen an 53 Standorten die Dienste des BRAIN-Verbundnetzes, unter anderem

- WiN-Backup über BRAIN: Redundanter WiN-Zugang für BRAIN-Verbundnetz-Teilnehmer; dieser kann genutzt werden, wenn die primäre WiN-Anbindung der Einrichtung unterbrochen ist.
 - Zugang zum Berliner Landesnetz über eine dedizierte LWL-Verbindung zum ITDZ; dies erlaubt den Verwaltungen der wissenschaftlichen Einrichtungen, direkt auf die Formularserver im Intranet des Landes Berlin zuzugreifen.
- Vergabe von Glasfasern und WDM¹²-Kanälen zur Nutzung durch den DFN-Verein für das WiN¹³-Kernnetz in Berlin und für Zugangsleitungen.
 - Vergabe von Glasfasern und WDM-Kanälen an einzelne Einrichtungen zur dedizierten Nutzung (interne Vernetzung der in der Stadt verteilten Standorte).
 - Beratung und Unterstützung der BRAIN-Teilnehmer bei Bau oder Inbetriebnahme neuer LWL sowie der Nutzung neuer Dienste im BRAIN.
 - Durchführung des Pilotprojekts BRAIN-SAN¹⁴, mit dem Ziel, die Infrastruktur für eine verteilte Datenhaltung der Berliner Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen zu schaffen.

Alle von BRAIN angebotenen Dienste werden in einem einheitlichen Vertrag zusammengefasst, die anfallenden Investitions- und Betriebskosten werden entsprechend der Zahl der Anschlüsse, Anschlussbandbreiten und Streckenlängen auf die Teilnehmer umgelegt, wobei auch der Anteil der Grundfinanzierung für die Einrichtung durch das Land Berlin eine entscheidende Rolle spielt.

BRAIN-WDM – CWDM-Technik für das BRAIN-Leitungsnetz

BRAIN setzt derzeit auf zehn Strecken WDM-Technik für den Transport von Gigabit-Ethernet, Fast-Ethernet, ATM, Fibre Channel und SDH¹⁵ ein. Die WDM-Geräte der Serie TS1100 des schwedischen Herstellers Transmode sind über eine einzelne dedizierte Glasfaser miteinander verbunden. Der modulare Aufbau der Geräte ermöglicht künftige Erweiterungen durch den Einsatz von Modulen (z. B. Transponderkarten, Multiplexer/DeMultiplexer) (Abbildung 4.6).

Das Management der Geräte erfolgt vollständig über eine einfach gehaltene Web-Schnittstelle über SNMP¹⁶. Ein dedizierter Server mit proprietärer Steuerungssoftware

¹²WDM – Wavelength-Division-Multiplexing; Laserlicht unterschiedlicher Wellenlängen wird benutzt, um gleichzeitig mehrere Kommunikationskanäle (Wellenkanäle) über eine Glasfaser zu übertragen

¹³WiN – Wissenschaftsnetz des Vereins zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes

¹⁴SAN – Storage Area Network: Speichernetzwerk, in dem Clients und Speichergeräte über Fibre Channel Daten austauschen

¹⁵SDH – Synchronous Digital Hierarchy

¹⁶SNMP – Simple Network Management Protocol

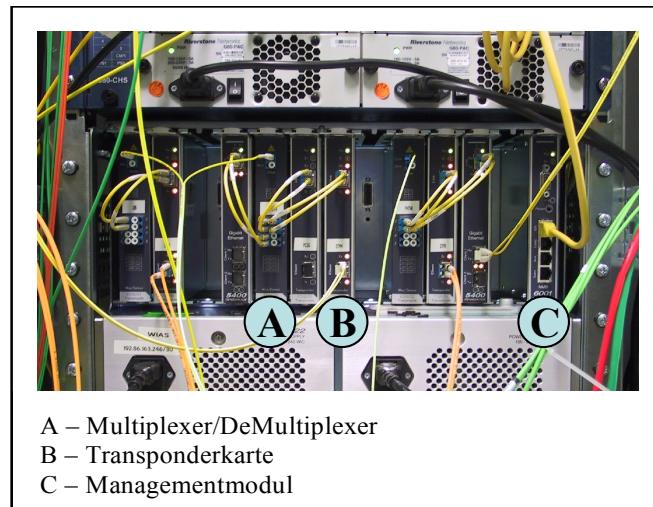


ABBILDUNG 4.7: WDM-Gerät TS1100 der Firma Transmode.

ist nicht notwendig. Die WDM-Komponenten sind in der Lage, vier unabhängige Bandbreiten bis 2,5 Gbit/s über acht Farben gleichzeitig zu übertragen. Durch die Kombination von CWDM mit TDM¹⁷-Modulen lassen sich mehrere Anwendungen über eine Wellenlänge übertragen. Die Daten der unterschiedlichen Anwendungen werden zeitlich versetzt auf die Trägerwelle (entspricht einem 2,5 Gbit/s optischen Kanal) moduliert. Beispielsweise werden auf einer Strecke mit Hilfe eines TDM-Moduls zwei Fast-Ethernet-Kanäle und zwei STM1-Kanäle innerhalb einer Wellenlänge über eine Faser übertragen. Auf diese Weise wurden Engpässe im Glasfasernetz behoben und Glasfaserstrecken eingespart.

Ende 2007 werden im BRAIN mit WDM-Technik Strecken in einer Gesamtlänge von 168 km Einzelfaser betrieben. Würde für jede der im WDM-Kernnetz transportierten Anwendungen eine separate Doppelfaser geschaltet werden, ergäbe sich eine Gesamtlänge von 1.070 km Einzelfaser, dies entspricht einer Ersparnis von 84 %.

Zentrales Management

Sämtliche aktiven Netzkomponenten (Router, Switches und WDM-Geräte) werden zentral vom ZIB aus administriert und überwacht. Hierfür werden sowohl eigenentwickelte Programme (vorwiegend in der Programmiersprache Perl) als auch die Open Source Software Nagios (<http://www.nagios.org>) eingesetzt, die auf UNIX-Systemen lauffähig sind; als Server werden Systeme mit Debian GNU/Linux verwendet. Zum Zwecke der Serverkonsolidierung kommt Virtualisierung auf Basis

¹⁷TDM – Time Division Multiplexing, Zeitmultiplexverfahren: die Übertragung der Daten verschiedener Anwendungen erfolgt zeitlich versetzt innerhalb eines Datenkanals.

von XEN¹⁸ zum Einsatz. Der aktuelle Status des Gigabit-Ethernet-Kernnetzes kann über eine Webschnittstelle (<http://www.brain.de/netzstatus>) mit allen gängigen Web-Browsern von überall eingesehen werden. Sowohl die externe als auch die interne Dokumentation werden ebenfalls über Webschnittstellen bereitgestellt. Zu den regelmäßigen Aufgaben des zentralen BRAIN-Netzwerkmanagements gehören auch das Schalten und die Inbetriebnahme neuer Glasfaser-Verbindungen, die Fehlersuche, Fehleranalyse und ggf. Fehlerbehebung innerhalb der Anbindungen der Standorte sowie insbesondere auch die Beratung der Einrichtungen in allen Fragen der Anbindung von entfernten Standorten ans BRAIN.

Pilotprojekt BRAIN-SAN

Im Rahmen von BRAIN wird derzeit, zusätzlich zum BRAIN-Verbundnetz, ein „BRAIN-SAN“ erprobt, um Möglichkeiten einer verteilten Datenhaltung der Berliner Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen zu schaffen. Im Zuse-Institut Berlin und in der Humboldt-Universität zu Berlin wird von BRAIN je ein Multi-Protocol-Router MPR7500 der Firma Brocade betrieben, zu denen jede interessierte Einrichtung zwei unabhängige Anbindungen zu ihren lokalen Fiber-Channel-Switches erhält (Abbildung 4.8).

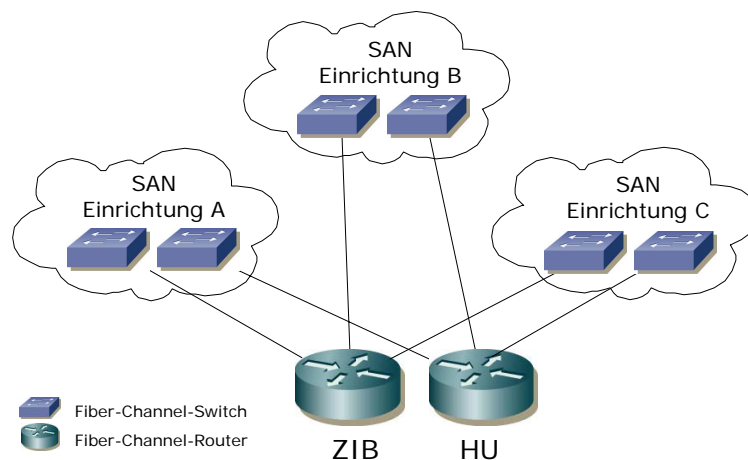


ABBILDUNG 4.8: Topologie BRAIN-SAN.

Während der Pilotphase bis Ende 2009 sollen Technik und Organisation erprobt werden. Die Netzanbindung sowie ein begrenztes Speichervolumen wird den derzeit fünf Pilotteilnehmern zunächst kostenfrei, danach zu geringem Entgelt in Berlin zur Verfügung gestellt. Ziel dieses Pilotbetriebes ist es zu prüfen, ob ein solcher Dienst über das Jahr 2009 hinaus angeboten wird. Diese Vorgehensweise

¹⁸XEN – Virtualisierungssoftware, die an der Universität Cambridge entwickelt wurde

steht auch im Einklang mit den von der DFG im Sommer 2006 herausgegebenen Empfehlungen, dass Hochschulen in Verbänden Dienstleistungen zur Datenhaltung gemeinsam anbieten bzw. nutzen sollen.

Folgende Dienste werden erprobt:

- Bereitstellung von „sicherem“ Festplattenspeicher: Einrichtung A betreibt ein SAN und bietet Einrichtung B Festplattenspeicher an; die Daten werden an unterschiedlichen Standorten gespiegelt und auf Magnetbänden gesichert (permanente Lösungen oder Überbrückung von Engpässen).
- Disaster Recovery für lokale Speichernetze: Einrichtung A betreibt ein SAN und möchte aus Gründen des Katastrophenschutzes Daten zusätzlich auch an einem anderen Standort B speichern.
- Anbieten von Magnetbandpools: Eine Einrichtung besitzt einen Speicherroboter und bietet anderen Einrichtungen Magnetbandpools an.
- Verbindung der „Teil“-SANs einer Einrichtung: Eine Einrichtung mit mehreren Standorten kann die Speicheranforderungen dezentraler Standorte über ihre Speicherkapazität am Hauptstandort erfüllen.
- Gemeinsamer Betrieb von Servern im SAN: Zwei Einrichtungen A und B betreiben je einen anonymen FTP-Server. Diese werden auf einem SAN gemeinsam angeboten, der Zugriff kann unverändert über die jeweilige Einrichtung erfolgen.

Für das Pilotprojekt sind derzeit zwölf Strecken über WDM-Verbindungen und vier weitere Strecken mit LWL-Doppelfasern realisiert.

Ausblick

Für das erste Quartal 2008 ist geplant, das BRAIN-Verbundnetz mit einem weiteren Kernnetzknotten nach Potsdam auszudehnen. Die Möglichkeit zur Erhöhung der Redundanz innerhalb des Kabelnetzes bzw. die Anbindung von Standorten in noch nicht per LWL erschlossenen Lagen wird geprüft. Dienste, die für die BRAIN-Community einen Mehrwert darstellen und über die BRAIN-Infrastruktur etabliert werden können, werden evaluiert und deren Umsetzung angestrebt.

Weitere Informationen zu BRAIN unter <http://www.brain.de>.

PUBLIKATIONEN

5.1 Preprints

Ein Verzeichnis aller Titel mit Abstracts ist im Anhang zu finden. Die Preprints sind abrufbar über

<http://www.zib.de/bib/pub/index.de.html>

5.2 Mitherausgabe von Publikationen

Artur Andrzejak

- Multiagent and Grid Systems – An International Journal, IOS Press, Amsterdam, Niederlande

Peter Deuffhard

- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Peking, China
- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science, Niederlande
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- European Journal of Applied Mathematics, Cambridge University Press, Vereinigtes Königreich
- Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications (NM-TMA), Global Science Press, Peking, China

Andreas Eisenblätter

- International Journal of Mobile Network Design and Innovation, Inderscience Publishers, Olney, Vereinigtes Königreich

Martin Grötschel

- Computational and Applied Mathematics, Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, Production: SOLGRAF Publicações, Rio de Janeiro, Brasilien
- Computing. Archives for Scientific Computing, Springer-Verlag, Wien, Österreich
- Mathematical Methods of Operations Research, Physica Verlag, An Imprint of Springer-Verlag GmbH
- Mathematical Programming A, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Networks, John Wiley & Sons, New York, USA
- Operations Research Letters, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Niederlande
- OR Transactions, Shanghai Scientific & Technological Publishing House, Shanghai, China

Hans-Christian Hege

- Book series „Visualization and Mathematics“, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- Video series „VideoMATH“, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York

Alexander Reinefeld

- Future Generation Computer Systems (FGCS), Elsevier Science, Niederlande
- International Journal of Grid and Utility Computing (IJGUC), Inderscience Enterprises Limited, Olney, Vereinigtes Königreich
- International Journal of Computer Science, Global Information Publ., Hong Kong, ISSN 1992-6669, Hongkong, VR China
- Journal of Grid Computing (JoGC), Springer-Verlag GmbH, Heidelberg

5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

1. K. I. Aardal, C. P. M. v. Hoesel, A. M. C. A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and solution techniques for the frequency assignment problem*, Annals of Operations Research **153** (2007), 79–129.
2. T. Achterberg und T. Berthold, *Improving the feasibility pump*, Discrete Optimization **4** (2007), Nr. 1, 77–86.

3. J. Alonso, L. M. Silva, A. Andrzejak und J. Torres, *High-available Grid services through the use of virtualized clustering*, IEEE-GRID, September 2007.
4. A. Andrzejak und A. Reinefeld (eds.), *Paradigms for scalable and dependable Grids*, Future Generation Computer Systems (FCGS) **23** (2007).
5. A. Andrzejak, M. Moser und L. Silva, *Managing performance of aging applications via synchronized replica rejuvenation*, 18th IFIP/IEEE Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2007), October 2007.
6. A. Andrzejak und L. Silva, *Deterministic models of software aging and optimal rejuvenation schedules*, 10th IFIP/IEEE Symposium on Integrated Management (IM 2007), Mai 2007.
7. E. Balas und R. Stephan, *On the cycle polytope of a directed graph and its relaxations*, Proceedings of Operations Research 2006 (K. Waldmann und U. Stocker, Hg.), Springer-Verlag, 2007, S. 203–208.
8. A. Bley, *Inapproximability results for the inverse shortest paths problem with integer lengths and unique shortest paths*, Networks **50** (2007), Nr. 1, 29–36.
9. A. Bley, *Routing and capacity optimization for IP networks*, Operations Research Proceedings 2007 (J. Kalcsics und S. Nickel, Hg.), 2008, erscheint im April 2008.
10. E. Bodden, M. Clasen und J. Kneis, *Arithmetic coding revealed - a guided tour from theory to praxis*, Techn. ber., Technical Report SABLE-TR-2007-5, Sable Research Group, School of Computer Science, McGill University, 2007.
11. H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *On the maximum cardinality search lower bound for treewidth*, Discrete Applied Mathematics **155** (2007), 1348–1372.
12. R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *A column-generation approach to line planning in public transport*, Transportation Sci. **41** (2007), Nr. 1, 123–132.
13. R. Borndörfer und T. Schlechte, *Models for railway track allocation*, Proceeding of the 7th Workshop on Algorithmic Approaches for Transportation Modeling, Optimization, and Systems (ATMOS 2007) (C. Liebchen, R. K. Ahuja und J. A. Mesa, Hg.), Internationales Begegnungs- und Forschungszentrum für Informatik (IBFI), Schloss Dagstuhl, Germany, 2007.
14. A. Brandt und M. Brandt, *On the stability of the multi-queue multi-server processor sharing with limited service*, Queueing Systems **56** (2007), 1–8.
15. S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, R. Köhle, T. Henkel, B. Küchler und C. Nölscher, *3d simulations of electromagnetic fields in nanostructures*,

- Modeling Aspects in Optical Metrology (H. Bosse, Hg.), Bd. 6617, Proc. SPIE, 2007, S. 66170V.
16. S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, R. Köhle, B. Küchler und C. Nöl-scher, *EMF simulations of isolated and periodic 3d photomask patterns*, Photomask Technology, Bd. 6730, Proc. SPIE, 2007, S. 6630.
 17. M. Clasen und H.-C. Hege, *Clipmap-based terrain data synthesis*, Proc. SimVis 2007 (T. Schulze, B. Preim und H. Schumann, Hg.), SCS Publishing House e.V., 2007, S. 385–398.
 18. A. Clemm, L. Z. Granville und R. Stadler (Hg.), *Managing virtualization of networks and services, 18th ifip/ieee international workshop on distributed systems: Operations and management, dsom 2007, san josé, ca, usa, october 29-31, 2007, proceedings*, LNCS, Bd. 4785, Springer, 2007.
 19. P. Deuffhard, *Painters, murderers, mathematicians*, Mathematics and Cul-ture in Europe. Mathematics in Art, Technology, Cinema, and Theatre, Springer-Verlag, 2007, S. 141–152.
 20. P. Deuffhard, R. Krause und S. Ertel, *A contact-stabilized Newmark me-thod for dynamical contact problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **73** (2007), Nr. 9, 1274–1290.
 21. G. Dolling, M. W. Klein, M. Wegener, A. Schädle, B. Kettner, S. Burger und S. Linden, *Negative beam displacement for negative-index photonic me-tamaterials*, Optics Express **15** (2007), Nr. 21, 14219–14227.
 22. J. Dornheim, H. Seim, B. Preim, I. Hertel und G. Strauß, *Segmentation of neck lymph nodes in CT datasets with stable 3D mass-spring models*, Academic Radiology (2) (2007), 1389–1399.
 23. F. v. d. Eijkhof, H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe reduction rules for weighted treewidth*, Algorithmica **47** (2007), Nr. 2, 139–158.
 24. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und I. Siomina, *Integrated access point pla-cement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office en-vironment*, Proc. WoWMoM'07, IEEE, 2007.
 25. H. Enke, M. Steinmetz, T. Radke, A. Reiser, T. Röblitz und M. Höggqvist, *AstroGrid-D: Enhancing astronomic science with Grid technology*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, 2007.
 26. B. Erdmann, M. Ljubijankic und C. Nytsch-Geusen, *Entwicklung einer Toolbox zur zwei- und dreidimensionalen instationären thermischen Bau-teilsimulation mit KARDOS*, Bauphysik **29** (2007), Nr. 1, 33–39.
 27. C. Förster, A. Brauer, J.P.Fürste, C. Betzel, M. Weber, F. Cordes und V. Erdmann, *Visualization of the tRNA(Ser) acceptor step binding site in the seryl-tRNA synthetase*, BBRC **362** (2007), Nr. 2, 415–418.

28. H.-F. Geerdes und A. Eisenblätter, *Reconciling theory and practice: A revised pole equation for W-CDMA cell powers*, Proc. MsWiM'07, 2007.
29. M. Gessat, S. Zachow, O. Burgert und H. Lemke, *Geometric meshes in medical applications - Steps towards a specification of geometric models in DICOM*, Int. J. of Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS) (2007), 440–442.
30. T. Granzer, F. Breitling, M. Braun, H. Enke und T. Röblitz, *Providing remote access to robotic telescopes by adopting Grid technology*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, 2007.
31. C. Grimme, T. Langhammer, A. Papaspyrou und F. Schintke, *Negotiation-based choreography of data-intensive applications in the C3Grid project*.
32. M. Grötschel, *Das Problem mit der Komplexität: $P = NP?$* , Kombinatorische Optimierung erleben – In Studium und Unterricht (S. Hußmann und B. Lutz-Westphal, Hg.), Vieweg-Verlag, Wiesbaden, 2007, S. 265–274.
33. M. Grötschel, *Schnelle Rundreisen: Das Travelling-Salesman-Problem*, Kombinatorische Optimierung erleben – In Studium und Unterricht (S. Hußmann und B. Lutz-Westphal, Hg.), Vieweg-Verlag, Wiesbaden, 2007, S. 95–128.
34. M. Grötschel und J. Lügger, *Die Wissenschaftsgalaxis: Wie soll die zukünftige Informationsversorgung aussehen?*, eUniversity – Update Bologna (R. Keil, M. Kerres und R. Schulmeister, Hg.), Waxmann-Verlag, 2007, S. 335–354.
35. S. Gubatz, V. J. Dercksen, C. Brüß, W. Weschke und U. Wobus, *Analysis of barley (*hordeum vulgare*) grain development using three-dimensional digital models*, The Plant Journal **52** (2007), Nr. 4.
36. B. Günther, F. Thiele, R. Petz, W. Nitsche, J. Sahner, T. Weinkauff und H.-C. Hege, *Control of separation on the flap of a three-element high-lift configuration*, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, January 2007, paper 2007-265 (15 pages).
37. A. Gürler, S. Moll, M. Weber, H. Meyer und F. Cordes, *Selection and flexible optimization of binding modes from conformation ensembles*, Biosystems (2007).
38. C. Hellmich, C. Kober und B. Erdmann, *Micromechanics-based conversion of CT data into anisotropic elasticity tensors, applied to FE simulations of a mandible, to appear*, Annals of Biomedical Engineering (2007).
39. W. Heppt, T. Hildebrandt, A. Steinmann und S. Zachow, *Aesthetic and function in rhinoplasty*, Springer Journal: Eur Arch Otorhinolaryngol **264** (Suppl 1), RL 126 (2007), 307.

40. V. Heuveline und N.-D. Hoang, *On two numerical approaches for the boundary control stabilization of semi-linear parabolic systems: a comparison*, Control of coupled partial differential equations, Int. Ser. Numer. Math., Bd. 155, Birkhäuser-Verlag, Basel, 2007, S. 95–117.
41. T. Hildebrandt, S. Zachow, A. Steinmann und W. Heppt, *Innovation in der Funktionell-Ästhetischen Nasenchirurgie: Rhino-CFD*, Face, Int. Mag. of Orofacial Esthetics (2007), 20–23.
42. B. Hiller und A. Tuchscherer, *Real-time destination-call elevator group control on embedded microcontrollers*, Operations Research Proceedings 2007 (J. Kalcsics und S. Nickel, Hg.), Springer-Verlag, 2008, erscheint im April 2008.
43. F. Hupfeld, T. Cortes, B. Kolbeck, J. Stender, E. Focht, M. Hess, J. Malo, J. Marti und E. Cesario, *XtreemFS: a case for object-based storage in Grid data management*, 3rd VLDB Workshop on Data Management in Grids, co-located with VLDB 2007, 2007.
44. M. Höggqvist, T. Röblitz und A. Reinefeld, *Stellaris: An RDF-based information service for AstroGrid-D*, German e-Science Conference, Max Planck Digital Library, Mai 2007.
45. R. Kähler, T. Abel und H.-C. Hege, *Simultaneous gpu-assisted raycasting of unstructured point sets and volumetric grid data*, Proceedings of IEEE/EG International Symposium on Volume Graphics 2007, A K Peters, 2007, S. 49–56.
46. V. Kaibel, M. Peinhardt und M. E. Pfetsch, *Orbitopal fixing*, Proc. of the 12th Integer Programming and Combinatorial Optimization Conference (IPCO 2007) (M. Fischetti und D. Williamson, Hg.), LNCS, Bd. 4513, Springer-Verlag, 2007, S. 74–88.
47. D. Kainmüller, T. Lange und H. Lamecker, *Shape constrained automatic segmentation of the liver based on a heuristic intensity model*, Proc. MICCAI Workshop 3D Segmentation in the Clinic: A Grand Challenge (2007), 109–116.
48. A. M. C. A. Koster und M. Scheffel, *A routing and network dimensioning strategy to reduce wavelength continuity conflicts in all-optical networks*, Proceedings of International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, April 2007.
49. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Demand-wise shared protection and multiple failures*, Proceedings of International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, April 2007.
50. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Tight lp-based lower bounds for wavelength conversion in optical networks*, Statistica Neerlandica **61** (2007), Nr. 1, 115–136.

51. A. M. C. A. Koster, A. Zymolka und M. Kutschka, *Algorithms to separate $\{0, \frac{1}{2}\}$ Chvátal-Gomory cuts*, Proceedings 15th Annual European Symposium on Algorithms (ESA 2007), Eilat, Israel, LNCS, Bd. 4698, Springer-Verlag, Oktober 2007, S. 693–704.
52. S. Kottha, K. Peter, T. Steinke, J. Bart, J. Falkner, A. Weisbecker, F. Viezens, Y. Mohammed, U. Sax, A. Hoheisel, T. Ernst, D. Sommerfeld, D. Krefting und M. Vossberg, *Medical image processing in MediGRID*, (2007).
53. S. Kube und M. Weber, *A coarse graining method for the identification of transition rates between molecular conformations*, J. Chem. Phys. **126** (2007), Nr. 024103.
54. A. Kuß, H.-C. Hege, S. Kroczyk und J. Börner, *Pipeline for the creation of surface-based averaged brain atlases*, **15** (2007), 17–24.
55. H. Lamecker, L. Kamer, A. Wittmers, S. Zachow, T. Kaup, A. Schramm, H. Noser und B. Hammer, *A method for the three-dimensional statistical shape analysis of the bony orbit*, Proc. Computer Aided Surgery around the Head (2007), 94–97.
56. T. Lange, M. Hünerbein, S. Eulenstein, S. Beller, P. M. Schlag und H. Lamecker, *A distance measure for non-rigid registration of geometrical models to intensity data*, Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery **2**, **Suppl. 1** (2007), 204–206.
57. T. Lange, H. Lamecker, M. Hünerbein, S. Eulenstein, S. Beller und P. M. Schlag, *A new class of distance measures for registration of tubular models to image data*, Proc. Bildverarbeitung für die Medizin (BVM) (A. H. et al., Hg.), Informatik aktuell, Springer, 2007, S. 101–105.
58. P. May, G. W. Klau, M. Bauer und T. Steinke, *Accelerated microrna-precursor detection using the smith-waterman algorithm on fpgas*, GCCB (W. D. et al., Hg.), Lecture Notes in Bioinformatics, Bd. 4360, Springer, 2007, S. 19–32.
59. R. Meier, J. Maigut, B. Kallies, N. Lehnert, F. Paulat, F. Heinemann, G. Zahn, M. Feth, H. Krautscheid und R. van Eldik, *[fe-iii(tmdta)](-)-twist-boat/half-chair conformer ratio reliably deduced from dft-calculated raman spectra*, Chemical Communications (2007), 3960–3962.
60. M. Menth, R. Martin, A. M. C. A. Koster und S. Orłowski, *Overview of resilience mechanisms based on multipath structures*, Proceedings of the 6th International Workshop on the Design of Reliable Communication Networks (DRCN 2007), La Rochelle, Frankreich, Oktober 2007.
61. M. Moser und S. Haridi, *Atomic commitment in transactional DHTs*, Proceedings of the CoreGRID Symposium, 2007.

62. J. Nadobny, M. Weihrauch, M. Weiser, J. Gellermann, W. Wlodarczyk, V. Budach und P. Wust, *Advances in the planning and control of the mr-guided regional hyperthermia applications*, Proc. Int. Conf. Electromagnetics in Advanced Applications, ICEAA, 2007, S. 1010–1013.
63. K. Neubert, H. Lamecker, H.-C. Hege und J. Rybak, *Model-based autosegmentation of brain structures in the honeybee using statistical shape models*, Proc. 8th Int. Congr. of Neuroethology (ICN), 2007.
64. M. Neumann, *Fare planning for public transport*, Operations Research Proceedings 2006 (K. Waldmann und U. Stocker, Hg.), Springer-Verlag, 2007, S. 61–66.
65. M. Neumann, *Mathematische Preisplanung im ÖPNV*, OR News (2007), Nr. 30, 29–31.
66. S. Orłowski, A. M. C. A. Koster, C. Raack und R. Wessäly, *Two-layer network design by branch-and-cut featuring MIP-based heuristics*, Proceedings of International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, April 2007.
67. S. Orłowski, M. Pióro, A. Tomaszewski und R. Wessäly, *SNDlib 1.0 – Survivable Network Design Library*, Proceedings of International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, April 2007.
68. P. Paar und M. Clasen, *Earth, landscape, biotope, plant. interactive visualisation with biosphere3d*, Proceedings of CORP - 12th International Conference on Urban Planning and Spatial Development in the Information Society, May 20th - 23rd (2007), 207 – 214.
69. G. J. Pearce, G. S. Wiederhecker, C. G. Poulton, S. Burger und P. S. J. Russell, *Models for guidance in Kagome-structured hollow-core photonic crystal fibres*, Optics Express **15** (2007), 12680.
70. S. Plantikow, A. Reinefeld und F. Schintke, *Distributed Wikis on structured overlays*, CoreGrid Workshop on Grid Programming Models, Grid and P2P System Architecture, Grid Systems, Tools and Environments, Juni 2007.
71. S. Plantikow, A. Reinefeld und F. Schintke, *Transactions for distributed Wikis on structured overlays*, in Clemm et al. [18], S. 256–267.
72. J. Pomplun, S. Burger, F. Schmidt, F. Scholze, C. Laubis und U. Dersch, *Finite element analysis of EUV lithography*, Modeling Aspects in Optical Metrology (H. Bosse, Hg.), Bd. 6617, Proc. SPIE, 2007, S. 661718.
73. J. Pomplun, S. Burger, L. Zschiedrich und F. Schmidt, *Adaptive finite element method for simulation of optical nano structures*, phys. stat. sol. (b) **244** (2007), 3419.
74. J. Pomplun, R. Holzlöhner, S. Burger, L. Zschiedrich und F. Schmidt, *FEM investigation of leaky modes in hollow core photonic crystal fibers*, Proc.

- SPIE, Photonic Crystal Materials and Devices VI (S.-Y. L. A. Adibi und A. Scherer, Hg.), Bd. 6480, 2007, S. 64800M.
75. J. Pomplun, L. Zschiedrich, R. Klose, F. Schmidt und S. Burger, *Finite element simulation of radiation losses in photonic crystal fibers*, phys. stat. sol. (a) **204** (2007), 3822.
76. C. Raack, A. M. C. A. Koster, S. Orłowski und R. Wessälly, *Capacitated network design using general flow-cutset inequalities*, Proceedings of International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien, April 2007.
77. I. Reinecke und P. Deuffhard, *A complex mathematical model of the human menstrual cycle*, Journal of Theoretical Biology **247** (2007), 303–330.
78. A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Device and method for retrieving/storing electronic data in a system with a plurality of data processing units*, United States Patent Application Publication No. US 2007/0165619 A1, Juli 2007.
79. A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *P2P routing of range queries in skewed multidimensional data sets*, Techn. Ber. ZR-07-23, Zuse-Institut Berlin, August 2007.
80. A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Vorrichtung und Verfahren zum Abrufen/Speichern von elektronischen Daten in einem System mit mehreren Datenverarbeitungseinheiten*, Europäisches Patent EP 1 744 257 A1, Januar 2007.
81. A. Reinefeld, F. Schintke und T. Schütt, *Vorrichtung und Verfahren zum Speichern/Abrufen von Objekten mit mehrdimensional adressierten, elektronischen Daten*, Europäische Patentanmeldung Nr. 06012030.0 vom 12.06.2006, Patent Nr: 1868114, 2007.
82. J. Sahner, T. Weinkauff, N. Teuber und H.-C. Hege, *Vortex and strain skeletons in Eulerian and Lagrangian frames*, September - October 2007, S. 980–990.
83. A. Schädle, D. Ruprecht und F. Schmidt, *Transparent boundary conditions - the pole condition approach*, Proceedings of Waves 2007 (N. B. et.al., Hg.), 2007, S. 301–303.
84. A. Schädle und L. Zschiedrich, *Additive Schwarz method for scattering problems using the PML method at interfaces*, Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI (O. B. Widlund und D. E. Keyes, Hg.), Lecture Notes in computational Science and Engineering, Bd. 55, Springer, 2007, S. 205–212.
85. A. Schädle, L. Zschiedrich, S. Burger, R. Klose und F. Schmidt, *Domain*

- decomposition method for Maxwells equations: Scattering off periodic structures*, J. Comput. Phys. **226** (2007), 477–493.
86. F. Schmidt, T. Hohage, R. Klose, A. Schädle und L. Zschiedrich, *Pole condition: A numerical method for Helmholtz-type scattering problems with inhomogeneous exterior domain*, J. Comput. Appl. Math. (2007), available online.
 87. F. Scholze, C. Laubis, U. Dersch, J. Pomplun, S. Burger und F. Schmidt, *The influence of line edge roughness and CD uniformity on EUV scatterometry for CD characterization of EUV masks*, Modeling Aspects in Optical Metrology (H. Bosse, Hg.), Bd. 6617, Proc. SPIE, 2007, S. 66171A.
 88. T. Schütt, F. Schintke und A. Reinefeld, *A structured overlay for multi-dimensional range queries*, Euro-Par Conference (T. P. Anne-Marie Kermarrec, Luc Bougé, Hg.), LNCS, Bd. 4641, Springer, August 2007, S. 503–513.
 89. K. Shi, H. Theisel, H. Hauser, T. Weinkauff, K. Matcovic, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Path line attributes - an information visualization approach to analyzing the dynamic behavior of 3D time-dependent flow fields*, Proc. Topo-In-Vis 2007, March 2007.
 90. K. Shi, H. Theisel, T. Weinkauff, H. Hauser, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Extracting separation surfaces of path line oriented topology in periodic 2D time-dependent vector fields*, 2007, WSCG 2007, Plzen, Czech Republic, January 29 - February 1, S. 75–82.
 91. L. M. Silva, J. Alonso, P. Silva, J. Torres und A. Andrzejak, *Using virtualization to improve software rejuvenation*, IEEE International Symposium on Network Computing and Applications (IEEE-NCA), July 2007, Best Application Paper Award.
 92. P. Sobe und K. Peter, *Combining compression, encryption and fault-tolerant coding for distributed storage*, 21th International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS 2007) Proceedings, IEEE, 2007, S. 1–8.
 93. E. Stahlberg, M. Babst, D. Popig und T. Steinke, *Molecular dynamics with fpgas: A portable api*, International Supercomputing Conference 2007 (ISC 2007), June 2007.
 94. E. Stahlberg, D. Popig, D. Ryle, M. Babst, M. T. K. Anderson und T. Steinke, *Molecular simulations with hardware accelerators: A portable interface definition for fpga supported acceleration*, Reconfigurable Systems Summer Institute 2007 (RSSI 2007), July 2007.
 95. H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *On the applicability of topological methods for complex flow data*, Topology-based Methods in Visualization (H. Hauser, H. Hagen und H. Theisel, Hg.), Mathematics and Visualization, Springer, 2007, S. 105–120.

96. M. Weber, S. Kube, L. Walter und P. Deuffhard, *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems*, Multiscale Model. Simul. **6** (2007), Nr. 2, 396–416.
97. M. Weihrauch, P. Wust, M. Weiser, J. Nadobny, S. Eisenhardt, V. Budach und J. Gellermann, *Adaptation of antenna profiles for control of MR guided hyperthermia (HT) in a hybrid MR-HT system*, Med. Phys. **34** (2007), Nr. 12, 4717–4725.
98. T. Weinkauff, J. Sahner, H. Theisel und H.-C. Hege, *Cores of swirling particle motion in unsteady flows*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (Proceedings Visualization 2007) **13** (2007), Nr. 6, 1759–1766.
99. T. Weinkauff, J. Sahner, H. Theisel, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *A unified feature extraction architecture*, Active Flow Control (R. King, Hg.), Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design (NNFM), 2007, S. 119–133.
100. T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Feature flow fields in out-of-core settings*, Topology-based Methods in Visualization (H. Hauser, H. Hagen und H. Theisel, Hg.), Mathematics and Visualization, Springer, 2007, S. 51–64.
101. M. Weiser, P. Deuffhard und B. Erdmann, *Affine conjugate adaptive newton methods for nonlinear elastomechanics*, Opt. Meth. Softw. **22** (2007), Nr. 3, 413–431.
102. A. Wix, K. Schaber, O. Ofenloch, R. Ehrig und P. Deuffhard, *Simulation of aerosol formation in gas-liquid contact devices*, Chem. Eng. Comm. **194** (2007), 565–577.
103. S. Zachow, A. Steinmann, T. Hildebrandt und W. Heppt, *Understanding nasal airflow via CFD simulation and visualization*, Proc. Computer Aided Surgery around the Head (2007), 173–176.
104. S. Zachow, M. Zilske und H.-C. Hege, *3D reconstruction of individual anatomy from medical image data: Segmentation and geometry processing*, 25. ANSYS Conference & CADFEM Users' Meeting, 2007, Proc. CD 2.12.15.
105. L. Zschiedrich, S. Burger, J. Pomplun und F. Schmidt, *Goal oriented adaptive finite element method for precise simulation of optical components*, Proc. SPIE, Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies XI (Y. Sidorin und C. A. Waechter, Hg.), Bd. 6475, 2007, S. 64750H.

5.4 Monographien

1. H.-C. Hege and R. Machiraju, *Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Volume Graphics*. Eurographics Association, Prag, 2007

5.5 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Daniel Baum (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

A Point-Based Algorithm for Multiple 3D Surface Alignment of Drug-Sized Molecules

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Anton Schiela (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

The Control Reduced Interior Point Method – A Function Space Oriented Algorithmic Approach

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Tobias Achterberg (Abt. Optimierung)

Constraint Integer Programming

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Andreas Bley (Abt. Optimierung)

Routing and Capacity Optimization for IP Networks

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Tobias Harks (Abt. Optimierung)

Multicommodity Routing Problems Selfish Behavior and Online Aspects

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Universität Potsdam

Steffen Prohaska (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Skeleton-based Visualization of Massive Voxel Objects with Network-like Architecture

Betreuer: Jürgen Döllner (Universität Potsdam)

5.6 Examensarbeiten

Freie Universität Berlin

Andre Massing (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

1D-Reduktion thermal signifikanter Aderstränge in der Hyperthermie-Modellierung

Betreuer: Martin Weiser (FU Berlin)

Kerstin Neubert (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Model-based Autosegmentation of Brain Structures in the Honeybee, Apis Mellifera

Betreuer: Randolph Menzel, Jürgen Rybak (FU Berlin), Stefan Zachow, Hans Lamecker (ZIB)

Michael Zilske (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Adaptives Remeshing von Nicht-Mannigfaltigen Dreiecksnetzen

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

Humboldt-Universität zu Berlin

Stefan Plantikow (Abt. Computer Science Research)

Transaktionen für verteilte Wikis auf strukturierten Overlay-Netzwerken

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

Technische Universität Berlin

Eren Bilgen (Abt. Optimierung)

Personalkostenminimierung bei der Einsatzplanung von parallelen identischen Bearbeitungszentren in der Motorradproduktion

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Annegret Dix (Abt. Optimierung)

Das statische Linienplanungsproblem

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Tim Januschowski (Abt. Optimierung)

Symmetry breaking for the maximal k -colourable subgraph problem

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Manuel Kutschka (Abt. Optimierung)

Algorithmen zur Separierung von $\{0,1/2\}$ -Schnitten

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Myriam Schade (Abt. Optimierung)

Verallgemeinerte Hajós-Konstruktionen und zirkulare Perfektheit

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Mathias Weege (Abt. Optimierung)

*Graphentheoretische Bestimmung regulärer Steuerungskonfigurationen in Wasser-
netzen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Leibniz-Universität Hannover

Chavdar Papazov (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

Morphing zwischen triangulierten Nicht-Mannigfaltigkeiten unter Berücksichtigung topologischer Änderungen

Betreuer: Franz-Erich Wolter (Leibniz-Universität Hannover, Hans-Christian Hege, Vincent J. Dercksen (ZIB)

Berufsakademie Berlin

Matthias Philipp (Abt. IT Services)

Auswahl und Anpassung eines Analysewerkzeuges für Grid-Cluster

Betreuer: Wolfgang Pyszkalski (ZIB)

SOFTWARE

6.1 Numerische Algorithmen

CodeLib

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von numerischen Algorithmen, genannt CodeLib, für Anwendungen auf dem Gebiet *Scientific Computing*.

Weitere Informationen finden sich auf den CodeLib-Webseiten unter:

<http://www.zib.de/Numerik/numsoft/CodeLib/>

<http://www.zib.de/Software/>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

NewtonLib

In dieser Software-Sammlung sind Implementierungen von Algorithmen aus dem Buch „Newton Methods for Nonlinear Problems – Affine Invariance and Adaptive Algorithms“ von Peter Deuffhard zusammengestellt.

Weitere Informationen finden sich auf den NewtonLib-Webseiten unter:

<http://www.zib.de/Numerik/numsoft/NewtonLib/>

<http://www.zib.de/Software/>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

CodeLab

CodeLab ist ein interaktives Laboratorium für die Durchführung von Experimenten mit ausgewählten numerischen Codes aus CodeLib und Newton.

Weitere Informationen finden sich unter:

<http://www.zib.de/Software/>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

JCMsuite

JCMsuite ist ein kommerziell vertriebenes Software-Paket zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen für optische Anwendungen. JCMsuite wird gemeinsam mit der JCMwave GmbH, Putzbrunn, entwickelt.

Weitere Informationen finden sich auf <http://www.jcmwave.com>

Ansprechpartner: Lin Zschiedrich (zschiedrich@zib.de),
Frank Schmidt (frank.schmidt@zib.de)

KARDOS

KARDOS löst nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichungen in 1D, 2D oder 3D. Es wird die Rothe-Methode verwendet, um die Adaptivität in Zeit und Ort zu implementieren. Als adaptiver Ortslöser wird der FEM-Baukasten KASKADE 2.0 verwendet. Für die Zeitdiskretisierung werden linear-implizite Einschrittmethoden vom Rosenbrock-Typ verwendet. Das Programm ist in Standard-C kodiert.

Ansprechpartner: Bodo Erdmann (erdmann@zib.de)

KASKADE

KASKADE ist ein Finite-Elemente-Baukasten zur Lösung partieller Differentialgleichungen. Gegenstand der aktuellen Entwicklungsarbeit ist die Version 7 (C++). Sie baut auf dem Dune-Interface auf (<http://www.dune-project.org>) und eignet sich zur Lösung von stationären oder zeitabhängigen Systemen von PDEs mit unterschiedlichen Diskretisierungen für die Variablen. Adaptive Gitterverfeinerung und -vergrößerung in ein, zwei und drei Raumdimensionen sind im Baukasten enthalten.

Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

ZIBgridfree

ZIBgridfree ist eine Software zur thermodynamischen Simulation von Wirkstoffmolekülen und Wirkstoff-Target-Komplexen. Im Berichtszeitraum wurde im Projekt Computational Drug Design die Software ZIBgridfree um einige mathematische Ansätze und einige Modellierungsmethoden erweitert. Mathematisch wurde das adaptive hierarchische Verfeinern gitterfreier Basisfunktionen eingefügt [1]. Außerdem wurde eine Umgewichtungsstrategie basierend auf Dichteschätzungsalgorithmen eingebracht [2]. Aus Modellierungssicht kamen periodische Randbedingungen und Simulationen mit explizitem und implizitem Wasser hinzu.

Publikationen

- [1] M. Weber, *Meshless methods in conformation dynamics*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 2006.
- [2] M. Weber, S. Kube, L. Walter und P. Deuffhard, *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems*, Multiscale Model. Simul. **6** (2007), Nr. 2, 396–416.

Ansprechpartner: Marcus Weber (weber@zib.de)

6.2 Visualisierung

Amira

Amira ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Geometrie-Rekonstruktion und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkernel kann um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für spezifische Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren.

Eine professionelle Endbenutzer-Version mit einem ausgewählten Satz von Modulen sowie eine erweiterbare Entwickler-Version wird von Mercury Computer Systems kommerziell unter den Marken Amira und seit 2007 auch Avizo angeboten. Im Laufe des Jahr 2007 traf Mercury die Entscheidung, dass Amira auf die Anwendungsbereiche Biologie und Medizin fokussiert werden soll. Die Weiterentwicklung von Amira wurde dazu von der 100-prozentigen Mercury-Tochter Visage Imaging übernommen. Daneben soll eine neues Produkt Avizo für die Bereiche Geo- und Materialwissenschaften etabliert werden, welches von Mercury Computer Systems selbst entwickelt wird. Im Herbst 2007 wurde Avizo 5 veröffentlicht. Neben den Basisversionen von Amira und Avizo sind jeweils mehrere Erweiterungspakete für Spezialaufgaben verfügbar.

Kooperationspartner des ZIB können eine spezielle Version der Software kostenfrei nutzen. Diese Software enthält, neben den Funktionen der kommerziellen Version, Entwicklungen aus aktuellen Forschungsschwerpunkten. Im Jahre 2007 wurde eine aktualisierte Version veröffentlicht, die neueste Forschungsergebnisse den Kooperationspartnern des ZIB einfach zugänglich macht.

Aktuell werden folgende Betriebssysteme unterstützt:

- Windows XP
- Windows XP x64 Edition

- Linux x86
- Linux x86_64 (AMD Opteron, Intel Xeon 64, etc.)

Aktuelle Informationen finden sich unter <http://amira.zib.de>.

Ansprechpartner: Steffen Prohaska (prohaska@zib.de)

Lenné3D

Lenné3D bezeichnet die am ZIB entwickelten Landschaftsvisualisierungssysteme. Der seit 2001 entwickelte Lenné3D-Player zeichnet sich durch eine Vielzahl von Features aus, die in der wissenschaftlichen Anwendung hilfreich sind. So stellt er unter anderem Szenen realistisch, skizzenhaft oder gemischt dar, bietet Kamerapfade und Video-Export für Offline-Darstellungen und erlaubt die interaktive Synchronisation mit GIS-Systemen wie dem LandXplorer. Die in C++ entwickelte Software ist für Windows (32-Bit) verfügbar. Der Spin-off Lenné3D GmbH nutzt dieses System für Dienstleistungsprojekte.

Das Nachfolgesystem Biosphere3D wurde mit dem Schwerpunkt auf Vegetationsdarstellung in großen Szenarien entwickelt. Im Gegensatz zum Lenné3D-Player kann die ganze Erde visualisiert werden, wodurch auch ausgedehnte Landschaftsprojekte an einem Stück verarbeitet werden können. Das System ist in C++ geschrieben. Unterstützt werden zur Zeit Windows XP und Vista in 32 und 64 Bit. Für externe Softwareentwickler steht das System unter der MPL unter <https://svn.zib.de/lenne3d>

bereit. Die Verfügbarkeit für Anwender wird bekanntgegeben unter <http://www.zib.de/visual/software/>

Ansprechpartner: Malte Clasen (clasen@zib.de)

6.3 Optimierung

ZIB Optimization Suite

Die ZIB Optimization Suite umfasst die Teilprodukte SCIP, SoPlex und Zimpl. Diese drei Produkte sind zur einfacheren Bedienbarkeit nunmehr in einem gemeinsamen Paket enthalten, das unter <http://zibopt.zib.de> erhältlich ist. Sie können natürlich auch weiterhin separat heruntergeladen und benutzt werden.

SCIP

Gemischt-ganzzahlige Programme (mixed integer programs, MIPs), Constraint-Programme (CPs) und Erfüllbarkeitsprobleme (Satisfiability problems, SAT) lassen sich durch das gleiche Grundverfahren lösen: Man zerlegt eine gegebene Pro-

bleminstanz sukzessive in kleinere Teilprobleme, bis diese auf einfache Weise zu lösen sind. Dadurch entsteht ein Branch-and-bound-Baum, dessen Knoten Teilproblemen und dessen Blätter einfach zu lösenden Teilproblemen entsprechen. Das Lösen aller Blätter führt dann zu einer Lösung des ursprünglichen Problems. In praktischen Implementierungen wird dieses Grundverfahren für MIPs, CPs und SAT-Instanzen jeweils durch sehr verschiedene Verfahren ergänzt, die der Beschleunigung des Lösungsprozesses dienen. Gemischt-ganzzahlige Programmierung basiert auf dem Lösen von LP-Relaxierungen, die gute Schranken für die Teilprobleme liefern und durch Schnittebenen zusätzlich verstärkt werden können (Branch-and-cut). Für CPs verwendet man Domain-Propagierung, um aus (in Teilproblemen) eingeschränkten Wertebereichen von Variablen und aus Constraints weitere Einschränkungen abzuleiten. Die Stärken des SAT-Lösens liegen in der Analyse von Konflikten, die sich aus Branching-Entscheidungen ergeben haben, und in der Idee, den Löseprozess unter bestimmten Voraussetzungen neu zu starten, um globale Verfahren erneut anwenden zu können.

Constraint-ganzzahlige Programme (CIPs) stellen eine Vereinigung dieser drei Konzepte dar. Die Software SCIP (Solving Constraint Integer Programs) wurde entwickelt, um MIP-, CP- und SAT-Techniken zu kombinieren. Ziel ist es, sowohl von den flexiblen Modellierungsmöglichkeiten der Constraint-Programmierung als auch von den effizienten, auf die jeweilige spezielle Struktur abgestimmten MIP- und SAT-Lösungstechniken zu profitieren.

SCIP kann zum einen als Branch-cut-and-price-Bibliothek verwendet werden, in welche problemspezifische Constrainttypen, aber auch weitere Komponenten wie z. B. Primalheuristiken, Branchingregeln, zusätzliche Relaxierungen oder Separierer eingebunden werden.

Weiterhin stellt SCIP eine Vielzahl von Komponenten zum Lösen gemischt-ganzzahliger Programme zur Verfügung. Dadurch kann SCIP auch als Blackbox-Löser für MIPs eingesetzt werden. Unabhängige Vergleichsrechnungen von Hans Mittelmann (<http://plato.asu.edu/ftp/milpf.html>) zeigen, dass SCIP mit SoPlex oder CLP der derzeit schnellste nichtkommerzielle Löser für gemischt-ganzzahlige Programme ist.

Als Teil der ZIB Optimization Suite stellt SCIP ein leistungsstarkes Optimierungswerkzeug dar, das bereits mit großem Erfolg in verschiedenen Projekten innerwie außerhalb des ZIBs und in der Lehre eingesetzt wird.

Die im September 2007 erschienene Version 1.00 von SCIP ist online verfügbar unter <http://scip.zib.de>.

SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von linearen Programmen (LPs). Das Programm beinhaltet sowohl primale als

auch duale Lösungsroutinen und ist als Klassenbibliothek in C++ implementiert. SoPlex kann als Unteroutine in anderen Programmen, aber auch selbständig verwendet werden. Das Einlesen von Problemen erfolgt in den Standardformaten MPS und LP. Der Code wurde von Roland Wunderling am ZIB im Rahmen seiner Dissertation *Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus* (Report 96-09) entwickelt und hat registrierte Nutzer in mehr als 50 Ländern. Im Jahr 2006 wurde SoPlex in die renommierte Benchmark-Suite SPEC CPU2006 aufgenommen, die zum Vergleich von Architekturen und Compilern von allen großen Herstellern genutzt wird. Der Code wird in Zusammenarbeit mit Lizenznehmern fortlaufend gewartet und weiterentwickelt.

Im vorletzten Jahr wurden für SoPlex Fehlerbehandlungen durch *Exceptions* eingeführt. Im Berichtszeitraum wurde gezeigt, dass durch die Verwendung von Exceptions kein signifikanter Nachteil bei der Laufzeit entsteht. Daraufhin ist diese Art der Fehlerbehandlung standardmäßig in SoPlex übernommen worden. Um für unsere Industriepartner eine hohe Codequalität zu gewährleisten, haben wir außerdem damit begonnen, SoPlex mit professionellen Codeanalysetools zu untersuchen.

Die seit September 2007 erhältliche Version 1.3.2 ist mehr als 200 mal heruntergeladen worden. Durchschnittlich wird die Web-Seite über 550 mal pro Tag besucht. Weitere Informationen finden sich unter <http://soplex.zib.de>.

Zimpl

Zimpl ist eine Programmiersprache, um das mathematische Modell eines Problems in ein lineares oder gemischt-ganzzahliges Programm zu übersetzen. Das Ergebnis wird als MPS-Datei oder LP-Datei ausgegeben und kann dann von gängigen LP-Lösern wie z. B. SoPlex und MIP-Lösern wie z. B. SCIP verarbeitet werden, siehe Abschnitt 2.2.8.

Das links stehende lineare Programm lässt sich in Zimpl wie rechts angegeben schreiben:

$\begin{array}{ll} \min & 2x + 3y \\ \text{subject to} & x + y \leq 6 \\ & x, y \geq 0 \end{array}$	<pre>var x; var y; minimize cost: 2 * x + 3 * y; subto c0: x + y <= 6;</pre>
---	---

Man erhält dann die zugehörige MPS-Datei:

```

NAME          ex1.mps
ROWS
  N  OBJECTIV
  L  c0
COLUMNS
  x      OBJECTIV      2
  x      c0             1
  y      OBJECTIV      3
  y      c0             1
RHS
  RHS    c0             6
ENDATA

```

Zimpl wurde auch dieses Jahr wieder in mehreren Projekten und Vorlesungen erfolgreich eingesetzt, siehe Abschnitt 2.2.8. Das Programm wird kontinuierlich entsprechend den Anforderungen in den Projekten und von Seiten der Nutzer weiterentwickelt. 2007 wurden zwei neue Releases veröffentlicht.

Zimpl ist online verfügbar unter <http://zimpl.zib.de/>.

Ansprechpartner: Marc Pfetsch (pfetsch@zib.de)

LP-Basisverifizierer perPlex

Mit perPlex lassen sich Zulässigkeit, Optimalität und Ganzzahligkeit von LP-Lösungen verifizieren. Zu einem linearen Program im MPS-Format und einer Basis berechnet perPlex die primalen und dualen Variablen mit rationaler Arithmetik und bestimmt, ob die Basis tatsächlich zulässig und optimal ist. Die Ganzzahligkeit von ganzzahligen Variablen kann ebenfalls überprüft werden. Der exakte Wert der Zielfunktion und der Variablen wird ausgegeben.

perPlex ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/perplex>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

MIPLIB 2003

Um den Bedarf der Forscher nach Zugriff auf interessante gemischt-ganzzahlige lineare Programme (MIP or Mixed Integer Program) zu bedienen, erzeugten R. E. Bixby, E. A. Boyd und R. R. Indovina 1992 die MIPLIB, eine Bibliothek elektronisch verfügbarer Probleme. Durch die Fortschritte bei den MIP-Lösern wurde es später notwendig, die Bibliothek zu überarbeiten, obsolet gewordene Probleme zu entfernen und neue, schwierigere hinzuzufügen.

Dies wurde 1996 von R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal, and M. W. P. Savelsbergh durchgeführt.

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

In Absprache mit den bisherigen Betreuern ist die MIPLIB 2003 an das ZIB gekommen und wird hier unter der neuen Adresse <http://miplib.zib.de> überarbeitet und betreut.

Inzwischen erfreut sich die „neue“ MIPLIB regen Zuspruchs und ist bereits in mehreren Veröffentlichungen zitiert worden.

Die Problem-Bibliothek wird kontinuierlich verbessert und gepflegt.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de), Tobias Achterberg (achterberg@zib.de)

SteinLib Testdata Library

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

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

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

Es hat sich gezeigt, dass sich, wie erhofft, immer mehr Veröffentlichungen darauf beziehen.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

SNDlib – Survivable Network Design library

SNDlib ist eine Bibliothek von standardisierten Testdatensätzen für die Festnetzplanung in der Telekommunikation. Ziel der SNDlib ist es, realistische Datensätze

öffentlich verfügbar zu machen, um mathematische Modelle und Optimierungsalgorithmen vergleichbar zu machen. Neben den Testdaten umfasst die **SNDlib** auch die besten bekannten primalen und dualen Lösungen, eine Publikationsliste, eine Konferenzliste und eine Mailingliste. All diese Informationen sind seit Dezember 2005 unter der Adresse <http://sndlib.zib.de> abrufbar.

Im letzten Jahr wurde die **SNDlib** um das GML-Format erweitert, um mit Hilfe öffentlich verfügbarer Standardtools die Ausgangsnetze und die berechneten Netzkonfigurationen einfach visualisieren zu können.

Die Bekanntheit der **SNDlib** ist im Vergleich zum Vorjahr wieder deutlich gestiegen. Auf der Webseite wurden im Berichtszeitraum über 3.400 unterschiedliche Besucher mit rund 40.000 Zugriffen von Universitäten, Forschungseinrichtungen und Netzbetreibern aus über 65 Ländern registriert. Der Java-Quellcode mit den in der **SNDlib** verwendeten Datenstrukturen zur Bearbeitung von Netzdaten wurde mehr als 150 mal heruntergeladen. Die Konferenzliste und die Publikationsliste der **SNDlib** wurde stetig erweitert und aktualisiert.

Auf der International Network Optimization Conference (INOC 2007) haben verschiedene Arbeitsgruppen Daten der **SNDlib** in Veröffentlichungen und Vorträgen genutzt, um verschiedene Modelle und Algorithmen auf standardisierten Netzdaten miteinander vergleichen zu können. Auf derselben Konferenz haben wir einen Vortrag über die **SNDlib** gehalten und gemeinsam mit unseren Kollegen von der TU Warschau einen Beitrag im Konferenzband veröffentlicht [67]. Eine erweiterte Version davon wurde bei der Zeitschrift *Networks* eingereicht.

Ansprechpartner: Sebastian Orłowski (orłowski@zib.de), Roland Wessälly (wessaely@zib.de)

MCF – Netzwerksimplexalgorithmus

MCF ist eine der schnellsten Implementierungen des Netzwerksimplexalgorithmus. Der Code ist in C implementiert. Er fand unter den Bezeichnungen **181.mcf** und **429.mcf** Eingang in die Benchmarksuiten CPU2000 und CPU2006 der Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC) und ist damit eines der Standardprogramme zum Testen neuer Mikroprozessoren. MCF ist unter der Adresse <http://www.zib.de/Optimization/Software/Mcf/mcf.en.html> erhältlich und kann für akademische Zweck frei verwendet werden.

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. Die meisten dieser Module werden in kommerziellen Planungssystemen industriell eingesetzt.

VS-OPT

VS-OPT ist ein Optimierungstool zur Fahrzeugumlaufplanung im öffentlichen Personennahverkehr. Es ist bekannt, dass sich Umlaufplanungsprobleme als Mehr-güterflussprobleme modellieren lassen. VS-OPT implementiert dazu eine neuartige Lagrangean-Pricing-Technik, die eine beweisbar flottenoptimale Lösung auch größter Instanzen erlaubt. Das Modul wird vom ZIB-Spin-off Löbel, Borndörfer & Weider GbR gewartet und weiterentwickelt. Es ist in das industrielle Planungssystem MICROBUS 2 der IVU Traffic Technologies AG integriert und wird von vielen Verkehrsbetrieben im In- und Ausland eingesetzt. Erhebliche Einsparungen durch VS-OPT sind dokumentiert. Die Teilkomponente MCF ist im Quellcode erhältlich und für akademische Zwecke frei verwendbar. Informationen zu VS-OPT sind unter der Adresse <http://www.zib.de/Optimization/Projects/Traffic/BMBF-VS> erhältlich.

DS-OPT

DS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr. Durch die Verwendung moderner Spaltenerzeugungstechniken ist eine Lösung auch sehr großer Szenarien unter Beachtung komplexer Regelwerke und Kapazitätsbedingungen möglich. Das Modul wird vom ZIB-Spin-off Löbel, Borndörfer & Weider GbR gewartet und weiterentwickelt. Es ist in das industrielle Planungssystem MICROBUS 2 der IVU Traffic Technologies AG integriert und wird von vielen Verkehrsbetrieben im In- und Ausland eingesetzt. Informationen zu DS-OPT sind unter der Adresse <http://www.zib.de/Optimization/Projects/Traffic/BMBF-DS> erhältlich.

IS-OPT

IS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur gleichzeitigen Planung von Fahrzeugumläufen und Fahrdiensten im öffentlichen Personennahverkehr. Anwendungsschwerpunkt ist der Regionalverkehr, da dort aufgrund langer Abloswege die Abstimmung von Fahrzeugen und Fahrern besonders wichtig ist. Eine simultane Planung erspart Planungsarbeit und setzt zusätzliche Optimierungspotenziale gegenüber einer herkömmlichen sequentiellen Planung frei. IS-OPT wird vom ZIB-Spin-off Löbel, Borndörfer & Weider GbR gewartet und weiterentwickelt. Das Tool ist in das kommerzielle Planungssystem MICROBUS 2 der IVU Traffic Technologies AG (Berlin) integriert und unter anderem bei den Gesellschaften der DB Stadtverkehr GmbH, des größten Regionalverkehrsbetreibers in Deutschland, im Einsatz. Informationen zu IS-OPT sind unter der Adresse <http://www.zib.de/Optimization/Projects/Traffic/BMBF-IS> erhältlich.

CS-OPT

CS-OPT ist eine Weiterentwicklung von DS-OPT zur Planung des Einsatzes von Flugzeugbesatzungen. Das Tool wurde von der Lufthansa Systems Berlin GmbH (LSB) lizenziert und in das kommerzielle Planungssystem NetLine/Crew integriert. Die Software wird seitdem von LSB weiterentwickelt und als Basis für die kommerzielle xOPT-Optimierungssuite verwendet. Von CS-OPT sind u. a. die Löser xOPT-tail, xOPT-crew und xOPT-roster zur Flugzeugumlauf-, Dienst- und Dienstreihenfolgeplanung im Luftverkehr abgeleitet, die von namhaften Fluggesellschaften im In- und Ausland eingesetzt werden. Informationen zu CS-OPT sind unter der Adresse <http://www.zib.de/Optimization/Projects/Traffic/LSB-CS> erhältlich.

TS-OPT

TS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur Allokation von Eisenbahnfahrtrassen. Es erlaubt die Bestimmung eines ertragsmaximalen Grobfahrplans (auf einer mesoskopischen Ebene) unter Beachtung von eisenbahntechnischen Nebenbedingungen wie Mindestzugfolgezeiten, Gleisbelegungen, usw.

TS-OPT wird derzeit im interdisziplinären BMWi-Verbundprojekt „Trassenbörse“ (FKZ 19M2019) in Zusammenarbeit mit dem Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik der TU Berlin, dem Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb des Instituts für Land- und Seeverkehr der TU Berlin, der Ilgmann & Miethner Management Consulting, Hamburg, der IABG, Ottobrunn, und dem Institut für Verkehrswesen, Eisenbahnbau und -betrieb der Universität Hannover entwickelt, siehe auch das Projekt Trassenbörse im Abschnitt 2.2.14.

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer (borndoerfer@zib.de), Andreas Löbel (loebel@zib.de), Thomas Schlechte (schlechte@zib.de), Steffen Weider (weider@zib.de)

Veranstaltungsplaner

Der **Veranstaltungsplaner** ist ein Web-Service des ZIB zur Optimierung von Touren für die Besucher der Langen Nacht der Wissenschaft in Berlin. Unter der Adresse <http://www.zib.de/vsp/> kann man eine Reihe von Veranstaltungen auswählen, die man gerne besuchen möchte. Der **Veranstaltungsplaner** berechnet daraufhin ein optimales Besuchsprogramm, bei dem unter Beachtung der Anfangs-, End- und Wegezeiten eine möglichst große Anzahl der gewünschten Veranstaltungen besucht wird. Ähnlich wie bei den bekannten Routenplanern für den Auto-, Bahn- oder Nahverkehr kann die optimale Tour in Form einer Liste und/oder in einer Kartendarstellung ausgedruckt werden, siehe auch Abbildung 6.1.

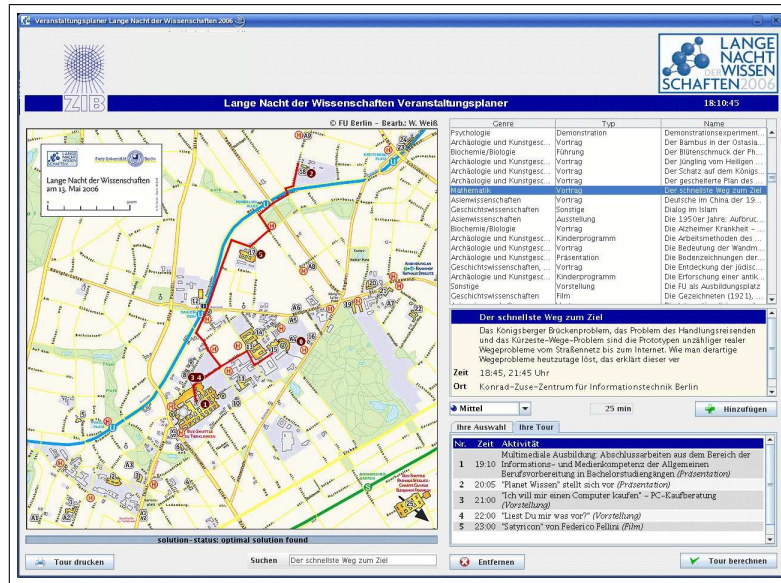


ABBILDUNG 6.1: Veranstaltungsplaner für die Lange Nacht der Wissenschaften in Berlin.

Die Berechnungen basieren auf einem graphentheoretischen Modell des Problems, das mit Hilfe eines dynamischen Programms gelöst wird. Im Unterschied zu den klassischen Tourenplanern, die kürzeste Wege berechnen, wird beim Veranstaltungsplaner ein Weg mit maximalem „Wert“ berechnet.

Ansprechpartner: Markus Reuther (reuther@zib.de)

6.4 Computeralgebra

Verfahren für REDUCE

Das ZIB vertreibt den LISP-Dialekt *Portable Standard LISP* (PSL) in der Version 4.2 und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.). Seit April 2004 ist die Version 3.8 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Vom ZIB wurden Vertriebslizenzen vergeben an: Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russland), Queen Mary and Westfield College (London), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Peking, China) sowie Software-Händler in Japan, Korea und Polen.

Neue Versionen der Software, z. B. für Macintosh mit Intel-Prozessoren werden angeboten. Auch eine Version für Macintosh im 64-bit-Modus ist seit dem Jahr 2007 erhältlich.

An vielen Modulen wurden im Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen und Fehler korrigiert. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der aktuellen REDUCE-Version 3.8. In Zusammenarbeit mit den Kollegen in Passau wurde die Benutzerschnittstelle überarbeitet, insbesondere das redfront Interface sowie das auf TeXMacS basierende Interface, vgl. <http://www.texmacs.org>.

Ansprechpartner: Winfried Neun (neun@zib.de)

6.5 Computer Science

dmscp – Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet

Im Zusammenhang mit Sicherheitsproblemen im Internet wird die Nutzung klassischer Dateitransfertools (wie `ftp`) zunehmend erschwert. Das mit der Secure Shell (`ssh`) gekoppelte `scp` bzw. `sftp` ist wegen der Verschlüsselung der Nutzdaten für große Datenmengen ungeeignet. Eine Kompromisslösung ist das ebenfalls auf `ssh` aufsetzende im ZIB entwickelte Produkt `dmscp`. Hier geschieht die Sitzungssteuerung und das Übertragen der Metadaten verschlüsselt, und die Nutzdaten werden unverschlüsselt übertragen. Eine Reihe von Maßnahmen verhindert das unbemerkte Verändern der Nutzdaten innerhalb des Netzes. Zusätzlich hat `dmscp` eine Reihe von Features, die im Zusammenhang mit Data Migration stehen, wie Filefragmentierung und Handeln voller Dateisysteme. Durch Optimierungen sowohl in der rechnerlokalen Ein-/Ausgabe als auch im Netz ist `dmscp` bis zu zweimal schneller als `ftp`. `dmscp` wird deutschlandweit vor allem im Hochleistungsrechnerbereich und an einigen wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA genutzt. Im Jahre 2007 wurden festgestellte Fehler behoben.

Die aktuelle Fassung ist in einem Drittmittelprojekt des ZIB bereits im Produktionseinsatz.

Weitere Informationen und die Quellen unter:

<http://www.zib.de/Software/Misc/>.

Ansprechpartner: Manfred Stolle (stolle@zib.de)

MetaLooper – Framework für die Konfiguration und Durchführung von Batchexperimenten

MetaLooper ist ein Java/XML-basiertes Framework, das die Durchführung und Konfiguration von numerischen Simulationen vereinfacht. Bei solchen Experimenten handelt es sich häufig um sogenannte *parameter sweeps*, bei denen eine große Anzahl von Parameterkombinationen durchprobiert wird. Die Praxis zeigt, dass die Spezifikation dieser Kombinationen möglichst einfach und ohne Codeänderungen erfolgen soll, um diese z. B. in Abhängigkeit von bereits durchgeführten

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell, S. Kameny)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner-Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H. M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
INEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
LINALG	Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebeck)
MATHML	Interface zu MathML (L. Alvarez)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)
NORMFORM	Normalformen von Matrizen (M. Rebeck, T. Moulders)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
QSUM	Summation von q-hypergeometrischen Termen (H. Böing, W. Koepf)
RATINT	Rationale Integration (N. Langmead)
RATAPRX	Rationale Approximation (L. Temme, W. Koepf)
REACTION	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse-Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gattermann)
TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGINT	Trigonometrische Integration (N. Langmead)
TRIGSIMP	Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG	Symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)
ZTRANS	Z-Transformation und inverse Z-Transformation (W. Koepf, L. Temme)

Tabelle 6.1: Teilmodule von REDUCE.

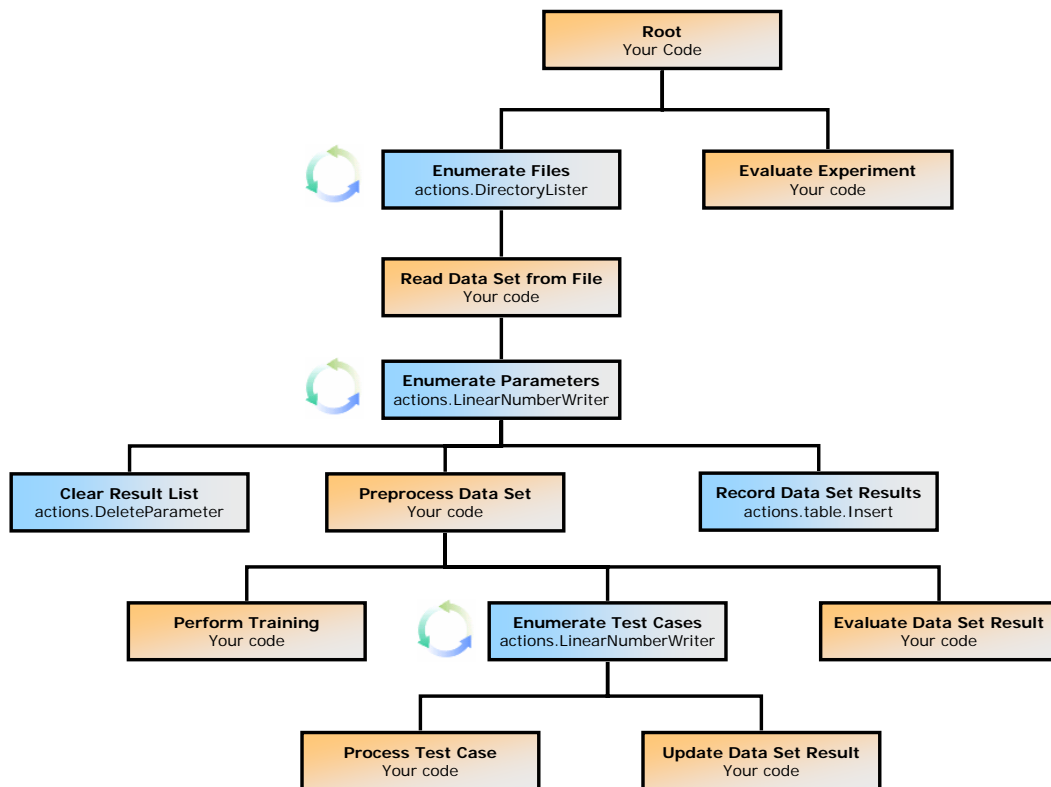


ABBILDUNG 6.2: Beispiel eines Baumes von Codekomponenten, die von MetaLooper ausgeführt werden.

Experimenten schnell anpassen zu können. Eine weitere gewünschte Eigenschaft eines solchen Experiment-Frameworks ist die Möglichkeit des unkomplizierten Zusammenstellens einzelner Komponenten (z. B. Algorithmen), um neue Szenarien testen zu können.

MetaLooper unterstützt beide Anforderungen, wobei die Beschreibung eines Experimentverlaufs mit Hilfe eines XML-basierten Skripts geschieht. Dieses vom Benutzer editierte Skript spezifiziert Parameter, Schleifen über diese Parameter, eingesetzte Java-Codekomponenten, sowie die Ausgabeart einer Experimentdurchführung. Dabei werden die einzelnen Codekomponenten zu einem Baum angeordnet, der durch einen modifizierten Tiefensuchalgorithmus abgearbeitet wird. Beim Besuch eines Baumknotens werden die benötigten Parameter bereitgestellt und der vom Benutzer angegebene Code ausgeführt (siehe Abbildung 6.2). Die Implementierung der Schleifen wird dadurch erreicht, dass jeder der Teilbäume wiederholt ausgeführt werden kann, bevor die Tiefensuche zu dem „Eltern-Knoten“ zurückkehrt.

Durch die hohe Universalität kann diese Software auch in anderen Forschungsbereichen für parametrische Studien oder für die schnelle Integration mehrerer Java-basierter Komponenten eingesetzt werden. Neben den Quellen steht auch ein Tutorium im Web zur Verfügung.

Weitere Informationen unter <http://www.zib.de/CSR/Software/>.

Ansprechpartner: Artur Andrzejak (andrzejak@zib.de)

Stellaris – Ein Service für verteiltes Metadaten-Management

In großen verteilten Systemen, wie z. B. dem D-Grid, gibt es sehr heterogene Anforderungen an die Verwaltung von Metadaten: Nutzer benötigen Informationen über die Nutzung ihrer Anwendungen und wissenschaftlichen Daten, und Dienstleister stellen Metadaten über den Zustand der Ressourcen zur Verfügung, die z. B. für das Management komplexer Workflows genutzt werden. Neben diesen unterschiedlichen Typen von Metadaten muss der Service erweiterbare Metadatenschemata unterstützen und bis zu Millionen von Einträgen skalieren.

Stellaris [44] ist ein Service für das Management von Metadaten im Grid. Es wurde im Rahmen des AstroGrid-D-Projekts als Informationsdienst entwickelt und wird in verschiedenen Anwendungsszenarien eingesetzt. Durch das vom W3C entwickelte Resource Description Framework (RDF) ist eine flexible und genaue Beschreibung von Daten, Anwendungen und Grid-Ressourcen möglich. Der Zugriff auf den Dienst, z. B. zur Speicherung oder Abfrage von Metadaten, erfolgt über eine HTTP-Schnittstelle. Für die Abfrage gespeicherter Informationen wird die Abfragesprache SPARQL verwendet.

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

Ansprechpartner: Mikael Höggqvist (hoegqvist@zib.de)

Theseus

Die Vorhersage von Proteinstrukturen aufgrund von Sequenzinformationen gehört zu den großen Herausforderungen in den Lebenswissenschaften.

Theseus ist ein Framework zur Erkennung des Faltungstyps eines Proteins (*Threading*). Je nach „Grad der Ähnlichkeit“ des strukturell unbekanntes Targetproteins mit bislang bekannten Proteinstrukturen können semi-quantitativ strukturelle und, davon abgeleitet, funktionelle Aussagen zum Targetprotein getroffen werden. Die Targetsequenz wird auf Repräsentanten von Faltungstypen einer Faltungsbibliothek (Template-Datenbank) aligniert, und dieses Alignment wird heuristisch bewertet. Zur Suche des optimalen Sequenz-Struktur-Alignments wird ein Multi-Queue-Branch-and-bound-Algorithmus benutzt. Das Framework erlaubt eine Integration verschiedener Bewertungsheuristiken und Template-Datenbanken. Die standardmäßig benutzte Bewertungsfunktion enthält Terme, die auf wissens-

basierten Potentialen beruhen und die strukturelle Umgebung im Template bewerten, sowie Terme, die die Güte des Alignments von Sekundärstrukturinformationen berücksichtigen.

Theseus ist in C++ implementiert und unter Verwendung von MPI parallelisiert.

Ansprechpartner: Thomas Steinke (steinke@zib.de)

6.6 Informationsdienste

Math-Net-Informationsserver

Unter der WWW-Adresse <http://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 betreut.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

Informationsdienste des eLib-Servers

Auf dem vom ZIB betriebenen eLib-Server werden weiterhin verschiedene Informationsdienste im World Wide Web angeboten.

- Der deutsche Spiegel der *Netlib* (<http://elib.zib.de/netlib/>) erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten.
- Eine umfangreiche Sammlung von Links auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World* (<http://www.math-net.de/links/>) angeboten, die ebenfalls zu den Kernbestandteilen des Math-Net gehören.
- Das Opt-Net, als elektronische Kommunikationsplattform für Optimierer. Es wurde 1993 am ZIB entwickelt.
- Der ICM'98-Server informiert weiterhin über den *International Congress of Mathematicians* (<http://elib.zib.de/ICM98/>), der im Jahre 1998 in Berlin stattfand. Aus Demonstrations- und Dokumentationszwecken soll dieser Server weiterhin zugänglich bleiben. Zur langfristigen Archivierung existiert bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDG) ein Spiegel (<http://webdoc.gwdg.de/ICM98/>) des ICM'98-Servers.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

Server der International Mathematical Union (IMU)

Das ZIB betreut technisch und inhaltlich den Web-Server der *International Mathematical Union* (<http://www.mathunion.org/>). Neben den allgemeinen Informationen beinhaltet der IMU-Server auch die neuesten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU, wie der *International Commission of Mathematical Instruction (ICMI)*, der *Commission on Development and Exchange (CDE)* und der *International Commission on the History of Mathematics (ICHM)*.

Die in den letzten Jahren aufgebauten Dienste *IMU-Net* und *EWDM* werden weiterhin von der Community positiv angenommen. *IMU-Net* ist der elektronische Rundbrief der IMU. Er dient der weltweiten Verbreitung von Empfehlungen und Entscheidungen der IMU. Den Rundbrief haben über 4.800 Mathematiker abonniert. In Anlehnung an *IMU-Net* betreibt die International Commission on Mathematical Instruction (ICMI) ebenfalls einen elektronischen Rundbrief mit z.Z. knapp 800 Abonnenten.

Das *Electronic World Directory of Mathematicians (EWDM)* ist die elektronische Version des World Directory of Mathematicians (WDM), dessen weiterer Betrieb aus Kostengründen vom Executive Committee der IMU eingestellt wurde. Zur Zeit haben sich über 1.500 Personen in die Datenbank eingetragen.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

Werkzeuge zur Erstellung von Webseiten

Im Rahmen des Math&Industry-Projekts wurden mehrere Software-Tools entwickelt, um Webseiten für Projektbeschreibungen zu erstellen. Neben acht Spezialmodulen für die Beschreibung verschiedener Aspekte eines Projekts, ist dabei insbesondere das Rahmenprogramm *WebSiteMaker* (http://www.math-net.org/create_website) zu nennen, dass durch die gesamte Websiteerstellung führt.

Die MIPM-Module (MIPM = Math&Industry Presentation Maker) und ihre Funktionen:

- MIPMPub - Publikationsbeschreibungen
- MIPMSoftware - Softwarebeschreibungen
- MIPMPers - Erstellung von Homepages von Personen
- MIPMOrg - Erstellung von Homepages von Institutionen und Firmen
- MIPMEvents - Veranstaltungsbeschreibungen
- MIPMLinks - Erstellung von kommentierten Linklisten
- MIPMGlossary - Erstellung von Glossaren der verwendeten Fachbegriffe
- MIPMText - erstellt nicht weiter spezifizierte/strukturierte Seiten

Die einzelnen Module finden sich auf der Homepage des Math&Industry-Projekts <http://www.mathematik-21.de/software/software.shtml>.

Ansprechpartner: Robert Roggenbuck (roggenbuck@zib.de oder auch toolmaster@mathematik-21.de), Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

6.7 KOBV-Dienste

KOBV-Dienste

Der KOBV betreibt Informationsdienste für bibliothekarische Angebote im Internet mit Schwerpunkt auf Berlin und Brandenburg; die KOBV-Internet-Angebote. Darüber hinaus ist der KOBV regionaler Dienstleister für die Bibliotheken.

I. KOBV-Informationsserver

Die KOBV-Homepage <http://www.kobv.de> ist der Einstiegspunkt für alle KOBV-Internet-Angebote. Gleichzeitig bietet der KOBV-Webserver Informationen rund um den KOBV für Benutzer und Bibliotheken. Er gibt beispielsweise einen Überblick über die Dienste für die Benutzer und für die Bibliotheken, informiert über die Organisationsstruktur, die KOBV-Gremien und Mitgliedsbibliotheken, aktuelle Ankündigungen von Workshops und Tagungen und vieles mehr.

2007 wurde im Rahmen des Relaunch der KOBV-Webseiten das Open Source Content-Management-System *Typo3* eingeführt. Damit einhergehend wurden die Seiten sowohl inhaltlich überarbeitet, als auch bezüglich der Barrierefreiheit optimiert. Die barrierefreie Gestaltung der Webseiten orientiert sich an den Richtlinien der BITV (Barrierefreie Informationstechnik-Verordnung) des Bundesinnenministeriums. Die Verwendung von Typo3 ermöglicht eine komfortable Einbindung und Verwaltung von Web2.0-Elementen, wie beispielsweise RSS-Feeds und Blogs.

II. KOBV-Internet-Angebote

- **KOBV-Portal**

Das „KOBV-Portal – Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg“ (kurz: KOBV-Portal) ist die regionale Internet-Plattform mit Zugang zu den Dienstleistungen aller KOBV-Bibliotheken und der KOBV-Zentrale. Enthalten sind verschiedene Arten elektronischer Ressourcen: Online-Kataloge, Bibliographien, Nachschlagewerke, Abstracts/Volltexte, Fachportale und Suchmaschinen. Diese sind – abhängig von den Zugriffsmodalitäten und der technischen Realisierung – durchsuchbar oder verlinken zu den Originalquellen. Nach einer erfolgreichen Recherche kann der Benutzer sehen, in welcher Bibliothek das Medium verfügbar ist und dieses zur Ausleihe vormerken oder über Fernleihe bestellen. Er kann auch den Open-Linking-Dienst SFX

der KOBV-Zentrale nutzen, um den Titel im Online-Buchhandel zu bestellen oder in Google Scholar und anderen Suchmaschinen zu recherchieren. Personalisierte Dienste erlauben die anonyme Selbstregistrierung, das Anlegen persönlicher Suchlisten sowie das Speichern von Suchanfragen und -ergebnissen für die spätere Wiederverwendung.

Das KOBV-Portal ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter: <http://digibib.kobv.de>

- **Verbundkataloge**

In den Verbundkatalogen werden mehrere Bibliotheken mit spezifischen Beständen/Materialien in einer Rechercheanfrage abgesucht. Die Verbundkataloge sind integraler Bestandteil des KOBV-Portals. Folgende Verbundkataloge sind im KOBV realisiert:

- **Verbundkatalog Film**

Recherchierbar sind Filmbestände und Filmliteratur aus 16 Bibliotheken in Deutschland. Mit einem absuchbaren Bestand von mehr als 200.000 Filmen (DVD, Videos) und 400.000 Bänden Filmliteratur ist der VK Film das Rechercheinstrument für Filme und Filmliteratur in deutschen Bibliotheken. Der VK Film ist in das Deutsche Filmportal integriert und bildet dort die Komponente zur Literaturrecherche in Bibliotheken. Der VK Film ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter:

<http://digibib.kobv.de/vkfilm> (Literatur und DVD, Videos) bzw. <http://digibib.kobv.de/vkfilm-filme> (nur DVD, Videos) oder

- **Verbundkatalog Judaica**

Recherchierbar sind Judaica-Bestände aus sechs regionalen Bibliotheken mit relevantem Judaica-Bestand sowie der Katalog der Judaica-Zeitschriften in Berlin und Brandenburg. Das VK Judaica ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter:

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

- **Verbundkatalog Noten**

Recherchierbar sind Notenbestände aus vier regionalen Bibliotheken mit relevantem Notenbestand. Das VK Noten wird Anfang 2008 für die Benutzer freigeschaltet und ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter: <http://digibib.kobv.de/vknoten>

- **KOBV-Volltextserver**

Der KOBV-Volltextserver bietet einen integrierten Zugriff auf lizenzierte Zeitschriftenartikel und frei zugängliche elektronische Publikationen. Mehr als 1.300.000 Zeitschriftenartikel aus 1.600 Zeitschriften aus dem ganzen

Spektrum der Wissenschaft und rund 6.000 elektronische Dokumente aus den regionalen Publikationsservern sind im Volltext suchbar. Alle Dokumente sind frei recherchierbar und werden bis einschließlich des Abstracts angezeigt; die lizenzierten Zeitschriftenartikel sind zugriffsbeschränkt und nur auf dem Campus der lizenznehmenden Einrichtung abrufbar. Der KOBV-Volltextserver wurde mittels Suchmaschinentechologie realisiert. Er ist eine Eigenentwicklung der KOBV-Zentrale unter Einsatz der Open-Source Programmbibliothek Lucene. Der KOBV-Volltextserver ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter: <http://volltexte.kobv.de>

- **KOBV-Bibliothekenführer**

Das Online-Gesamtverzeichnis der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken enthält rund 850 Bibliotheken. Mit seinen vielfältigen Suchmöglichkeiten – über eine anklickbare Landkarte, nach Fächerschwerpunkten, nach Stichwörtern aus Bibliotheksnamen – ist der Bibliothekenführer ein leicht bedienbares, modernes, rund um die Uhr zugängliches Rechercheinstrument.

Der KOBV-Bibliothekenführer ist über die KOBV-Homepage erreichbar oder direkt unter: <http://bibliotheken.kobv.de>

III. Dienstleistungen für Bibliotheken

Der KOBV hat in den zehn Jahren seines Bestehens eine Vielzahl von Dienstleistungen für die Bibliotheken aufgebaut und auf diese Weise einen entscheidenden Anteil zum Auf- und Ausbau einer modernen Informationsinfrastruktur in der Region Berlin-Brandenburg beigetragen. Durch den konsortialen Betrieb in der KOBV-Zentrale entstehen zudem beträchtliche Synergiegewinne für alle Beteiligten. Die Dienstleistungen für Bibliotheken im Einzelnen:

- **Plattform für den regionalen Nachweis**

Mit dem KOBV wurde für die Bibliotheken eine nutzerfreundliche Plattform aufgebaut, mittels derer die Benutzer unter einer Internet-Adresse die Kataloge aller KOBV-Bibliotheken gleichzeitig durchsuchen können. Der regionale Nachweis ist auf zwei Arten realisiert: über die *Verteilte Suche* und über den *KOBV-Index*. Die Verteilte Suche realisiert einen virtuellen Verbundkatalog mit direktem Zugriff auf die aktuellen Bibliothekskataloge. Im KOBV-Index sind die Daten physisch zusammengeführt; er enthält 15 Kataloge mit circa 11 Mio. Datensätzen und wird regelmäßig aktualisiert. Im KOBV-Portal ist der regionale Nachweis in einer Mischform aus virtueller Suche in Einzelbibliotheken und Suche im KOBV-Index realisiert.

- **Fremd- und Normdatenserver/Online-Fremddatenangebot sowie Bereitstellung komfortabler Werkzeuge zur Datenübernahme**

Zur Arbeitserleichterung und Effizienzerhöhung in der Katalogisierung stellt der KOBV seinen Bibliotheken ein großes Fremd- und Normdatenangebot auf einem zentralen Server und online zur Verfügung. Aus lizenzrechtlichen Gründen ist die Nutzung der Fremd- und Normdaten nur den KOBV-Bibliotheken gestattet. Der Fremd- und Normdatenserver des KOBV enthält die bibliographischen Daten der Deutschen Nationalbibliographie (DNB) und die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND) und Schlagwortnormdatei (SWD). Die Daten werden wöchentlich aktualisiert. In Absprache mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) und der Library of Congress haben die KOBV-Bibliotheken darüber hinaus Zugriff auf die Daten der Library of Congress, die der BVB auf seinem Server hostet und aktualisiert. Das Fremddatenangebot wird erweitert durch den Z39.50-Zugriff auf Online-Kataloge im Internet.

Durch entsprechende Absprachen mit Bibliotheksverbänden und Bibliotheken weltweit hat die KOBV-Zentrale das Online-Fremddatenangebot stark ausgebaut. Inklusive des Online-Angebotes haben die KOBV-Bibliotheken Zugriff auf insgesamt rund 80 Millionen Datensätze, die sie zur Fremddatenübernahme nutzen können.

Zur Unterstützung der Bibliotheken hat die KOBV-Zentrale zwei neuartige Werkzeuge für die Fremddatenübernahme entwickelt:

- Profilsuche (Sequentiell verteilte Suche) für Bibliotheken mit Z39.50-Client
- ZACK II für Bibliotheken ohne Z39.50-Client (ein Internet-Zugang genügt)

Beide Werkzeuge erlauben mehr als „nur“ die rationelle Recherche und komfortable Übernahme strukturierter Datensätze per Knopfdruck. Mit ihnen hat die KOBV-Zentrale die Personalisierung in die Fremddatenübernahme eingeführt: Jede Bibliothek kann ihre eigenen, spezifischen „virtuellen Verbände“ zur schnellen und qualitativ hochwertigen Fremddatenübernahme aufbauen, indem sie für das Absuchen der Fremddatenbanken eigene Profile (eines oder mehrere) definiert und sich – je nach Bedarf – spezifische virtuelle Fremddatenpools im Internet zusammenstellt.

- **ASP-Dienste (Application Service Providing)**

Im Rahmen der ASP-Dienste betreibt und pflegt die KOBV-Zentrale verschiedene Software-Anwendungen für die Bibliotheken und stellt ihnen Serverleistung und Speicherplatz zur Verfügung. Auf dieser Basis betreiben die Bibliotheken lokale Informationsangebote, wobei die KOBV-Zentrale für die gesamten technischen Belange zuständig ist und die Bibliotheken sich lediglich um bibliothekarisch-fachliche Dinge kümmern müssen. Die

KOBV-Zentrale hat in den vergangenen Jahren ein ganzes Bündel von ASP-Diensten aufgebaut:

– **Konsortialportal/Open Linking-Dienste**

Die KOBV-Zentrale betreibt und pflegt in einem konsortialen Modell die Portalsoftware MetaLib und die Open-Linking-Software SFX, beides Produkte der Firma Ex Libris. Die Bibliotheken bieten ihren Benutzern auf der Basis des ASP-Dienstes lokale Portale mit integriertem Open-Linking-Dienst oder nur den Open-Linking-Dienst an. Den ASP-Dienst für die Linking-Software SFX nehmen 14 Einrichtungen in Anspruch, davon 4 in Kombination mit der Portalsoftware MetaLib.

– **Verbundkataloge**

Der ASP-Dienst bietet Fachverbänden den Aufbau eines virtuellen Verbundkataloges. Was die Software anbelangt, sind die virtuellen Verbundkataloge integraler Bestandteil des KOBV-Portals, für das die Softwareprodukte MetaLib/SFX der Firma Ex Libris im Einsatz sind.

– **Bibliothekenführer**

Mit dem ASP-Dienst wurde für die Bibliotheken eine nutzerfreundliche Plattform aufgebaut, die unter einer Internet-Adresse die Informationen zu vielen Bibliotheken bündelt und so zu einem erhöhten Bekanntheitsgrad der bibliothekseigenen Sammlungen und Angebote beiträgt. Jede der 850 Bibliotheken hat einen eigenen Datensatz, den sie selbst pflegt. Im Einsatz ist die Software Aleph 500 der Firma Ex Libris, die in Eigenentwicklung der KOBV-Zentrale um eine Web-Katalogisierungsschnittstelle und eine Kommunikationsschnittstelle zur Bibliotheksdatei der Zeitschriftendatenbank (ZDB) ergänzt wurde. Erlaubt die Web-Katalogisierungsschnittstelle den Bibliotheken die einfache Pflege ihrer Bibliotheksdaten über das Internet, so kann mit Hilfe der Kommunikationsschnittstelle Doppelarbeit vermieden werden: Jede Änderung im Bibliothekenführer wird automatisch an die Bibliotheksdatei weitergegeben. Auf diese Weise braucht eine Bibliothek ihre Bibliotheksdaten nur noch an einer Stelle, im KOBV-Bibliothekenführer, zu pflegen.

– **Automatisierte Fernleihe/Online-Fernleihe/Abrechnungsverfahren**

Der ASP-Dienst umfasst sowohl Komponenten für die Automatisierung der Fernleihe in den Bibliotheken, als auch für die Online-Bestellung durch die Benutzer sowie Abrechnungsverfahren. Im Einsatz sind das Produkt *Zentraler Fernleihserver* der Firma OCLC sowie Eigenentwicklungen der KOBV-Zentrale. An dem Dienst „Automatisierte Fernleihe/Online-Fernleihe“ und dem daran gekoppelten, von der KOBV-Zentrale eingerichteten Abrechnungsverfahren nehmen 67 Bibliotheken teil, davon 47 Bibliotheken aus dem VÖB Brandenburg.

10 KOBV-Bibliotheken bieten ihren Benutzern zudem die Online-Fernleihe an, mittels derer ein Benutzer selbst online im KOBV-Portal bestellen kann.

– **Opus- und Archivierungsdienste**

Den Dienst nutzen 14 Bibliotheken im Produktivbetrieb. Zum Aufbau lokaler Publikationsserver betreibt und pflegt die KOBV-Zentrale in einem konsortialen Modell die Open-Source-Publikationssoftware *Opus* und speichert die elektronischen Dokumente auf einem zentralen Archivserver. Im Rahmen der erfolgreichen Begutachtung einer der Bibliotheken zum „DINI-Zertifikat Dokumenten- und Publikationsservice 2007“ hat der technische Service, der von der KOBV-Zentrale für alle Instanzen bereitgestellt wird, das Zertifizierungsverfahren ebenfalls erfolgreich durchlaufen.

– **Verde (im Aufbau)**

Bereits vor der Produktionsaufnahme kümmert sich die KOBV-Zentrale um die technischen Belange hinsichtlich *Verde*, das sie künftig ebenfalls im Rahmen eines ASP-Dienstes betreuen wird. Die Software *Verde*, ein neues Produkt der Firma Ex Libris, wird zur Verwaltung von Rechten an elektronischen Produkten und damit verbundenen Printmedien (Electronic Right Management, ERM) eingesetzt. An dem ASP-Dienst werden zunächst das Friedrich-Althoff-Konsortium (FAK) sowie zwei Bibliotheken teilnehmen.

• **Archivserver für Backfiles des Friedrich-Althoff-Konsortiums e. V.**

Der KOBV betreibt für das Friedrich-Althoff-Konsortium e. V. (FAK) einen Archivserver für die Zeitschriftenartikel der Verlage Springer, Kluwer und Elsevier (inkl. diverser Imprints wie z. B. Academic Press, Harcourt Health Science) mit insgesamt 1.300.000 Volltexten aus 1.600 Zeitschriften. Diesen hat die KOBV-Zentrale in Zusammenarbeit mit dem FAK aufgebaut, um den Zugriff auf Volltexte von Zeitschriftenartikeln zu sichern, für die das FAK dauerhafte Rechte im Rahmen seiner Verträge erworben hat. Die Anwendung hat Pilot-Charakter, um Kompetenz im Handling der Realisierung von dauerhaften Rechten zu entwickeln. Der Archivserver ist eine Eigenentwicklung auf Basis der Open Source- Programmbibliothek Lucene. Die Volltexte sind mittels Lucene indexiert und über den KOBV-Volltextserver recherchierbar.

Ansprechpartner: für sämtliche KOBV-Dienste: KOBV-Zentrale im ZIB
(kobv-zt@zib.de)

ORGANISATORISCHES

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984¹ gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuss des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

7.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 2007 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, HUB, Vorsitzender – bis 30.09.2007
Prof. Dr. Michael W. Linscheid, HUB – ab 01.10.2007; Vorsitz ab 11.03.2008
- Prof. Dr. Johann Köppel, TUB, stellvertretender Vorsitzender
- Prof. Dr. Helmut Keupp, FUB – bis 14.06.2007
Prof. Dr. Jochen Schiller, FUB – ab 15.06.2007
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Frauen
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 26. Januar und 10. Juli 2007.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Drs. h.c. Martin Grötschel.

¹<http://www.zib.de/General/Organization/gesetz/index.de.html>

7.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat in seiner Sitzung am 30.06.2005 beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates².

7.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

Der Verwaltungsrat hat als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates bestellt (Stand: Februar 2008):

- Prof. Dr. Alfred Louis – Universität des Saarlandes, Saarbrücken
Sprecher des Beirates
- Wolfgang Branoner – SNPC GbR, Berlin
- PD Dr. Michael Hofmeister – Siemens AG, München
- Prof. Dr. Thomas Liebling – Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne-Ecublens, Schweiz
- Dr. Joachim Römelt – Bayer HealthCare AG, Leverkusen
- Prof. Dr. Jörg-Rüdiger Sack – Carleton University, Ottawa, Kanada
- Dr. Karl-Viktor von Schöning, Berlin
- Dr. Horst D. Simon – NERSC, Lawrence Berkeley, National Laboratory, Berkeley, USA

Prof. Dr. Wolfram Büttner (OneSpin Solutions GmbH, München) und Dr.-Ing. Ehard Winter (ehemals E-Plus Mobilfunk GmbH) sind am 31.12.2007 als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates ausgeschieden.

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 14. und 15. Juni 2007 im ZIB.

²<http://www.zib.de/General/Organization/satzung/index.de.html>

7.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

- DFN – Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V.
- DMV – Deutsche Mathematiker-Vereinigung e. V.
- ECMI – European Consortium for Mathematics in Industry
- FAV – Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
- Forum für Zukunftsenergien e. V.
- 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
- UNICORE Forum e. V. (bis 31.12.2008)
- ZKI – Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e. V.
- Zuse-Park e. V.

7.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2007 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

Senior Fellowship:

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

Junior Fellowship:

- Prof. Dr. Reinhard Hochmuth (Universität Kassel)
Mathematische Multiskalen-Modellierung in der Neurobiologie
- Assistant Prof. Dr. Arie Koster (University of Warwick)
Diskrete Optimierung für Multi-Layer-Telekommunikationsnetze
- Prof. Dr. Rolf Krause (Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn)
Numerische Simulation in der Operationsplanung

- Prof. Dr. Sven O. Krumke (Technische Universität Kaiserslautern)
Online-Disposition von Einsatzfahrzeugen
- Prof. Dr. Marc Steinbach (Leibniz-Universität Hannover)
Optimierung in Energie- und Versorgungswirtschaft
- Prof. Dr. Gerd Teschke (Hochschule Neubrandenburg)
Inverse Probleme und Signal-Analyse in der Meteorologie
- Prof. Dr. Markus Wacker (Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Dresden)
Numerische Textilmodellierung
- Prof. Dr. Thomas Wolf (Brock University, St. Catharines, Kanada)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie

7.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzt sich wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)
Marlies Engelke
Bodo Erdmann
Hans-Florian Geerdes
Gabriele Kempf
Thorsten Koch
Dirk Krickel

7.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die finanzielle Lage des Landes Berlin geprägt – eine Situation, die immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausstattung zu 100 % vom Land finanzierten Einrichtung zu beeinträchtigen droht. Die im Sommer 2003 vereinbarten spürbaren Kürzungen der Gehälter aller Beschäftigten im öffentlichen Dienst des Landes Berlin zeigen das finanzielle Dilemma unverändert deutlich auf. Die besondere Situation im Wissenschaftsbereich ist in den Tarifregelungen in keiner Weise berücksichtigt – ein Zustand der für ein in weiten Teilen aus Drittmitteln finanziertes Institut und für dessen Beschäftigte (!) absurde Konsequenzen zur Folge hat. Deutlich spürbar geworden ist in diesem Zusammenhang die mangelnde Wettbewerbsfähigkeit des ZIB und anderer vom Berliner Tarifrecht beeinflusster Forschungseinrichtungen bei der Gewinnung von hochqualifizierten Wissenschaftlern. Hier sind Misserfolge

zu verzeichnen, die unmittelbar mit den verschlechterten Einkommensbedingungen zusammenhängen. Da zudem die Drittmiteleinnahmen aus Industrie und Wirtschaft in bestimmten Teilbereichen wie z. B. der Telekommunikation auf einem sehr niedrigen Stand verharren, sind die finanziellen Ausblicke nach wie vor nur bedingt erfreulich.

Der Zuschuss des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2007 „überrollt“ und in gleicher Höhe wie für 2006 eingestellt worden. Für die entscheidungsreifen *investitiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnte für die Beschaffung des HLRN-II-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin (ZIB) und Hannover (RRZN) mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von 30 Millionen Euro im Frühjahr 2007 das EU-weite Ausschreibungsverfahren durchgeführt und – nach einem langwierigen Auswahlprozess – durch Unterzeichnung des Kaufvertrages am 19. Dezember 2007 abgeschlossen werden. Das Hochleistungsrechner-system der Firma Silicon Graphics GmbH wird in der ersten Ausbaustufe im Mai 2008 installiert werden und 2009 seine volle Leistung erreichen. Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2007 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 15.706,6 T €; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 10.388,5 T € und auf Investitionen 5.318,1 T €.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss von 6.668 T € (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmiteleinnahmen ist – unter Einrechnung einer Investitionssumme von ca. 1.600 T € im Rahmen der D-Grid-Projekte – mit 6.175 T € anzusetzen. Damit werden die Drittmiteleinnahmen erneut einen Spitzenwert in der Geschichte des ZIB erreichen. Bezogen auf den Wirtschaftsplan 2007 ist ein ausgeglichener Jahresabschluss 2007 zu erwarten.

Die in den letzten Jahren positive Entwicklung der Einnahmen aus Drittmitteln, einem wesentlichen, wenn auch nicht dem einzigen Indikator für die Forschungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, lässt sich anhand der nachstehenden Tabelle (Jahresabschlussrelevante Angaben) ablesen.

	Drittmittel­einnahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte T €	Sonstige Einnahmen T €	Einnahmen insgesamt T €
	Wirtschaft/ Industrie T €	öffentliche Mittel T €	insgesamt T €	konsumentiv T €	investiv T €			
1998	1.102	1.926	3.028	7.514	434	0	46	11.022
1999	1.655	1.743	3.398	7.592	1.324	890	92	13.296
2000	1.375	1.911	3.286	7.222	537	0	148	11.193
2001	1.186	2.233	3.419	7.018	802	740	242	12.221
2002	1.003	3.178	4.181	6.711	1.411	2.725	183	15.211
2003	785	3.498	4.283	7.105	1.976	6.734	147	20.245
2004	777	2.968	3.745	6.932	441	1.227	245	12.590
2005	866	2.814	3.680	6.864	574	1.426	197	12.741
2006	972	3.656	4.628	6.848	438	939	267	13.120
2007 ¹	646	5.529	6.175	6.668	493	943	164	14.443

Tabelle 7.1: Einnahmen-Entwicklung
– ohne BRAIN-Serviceanteil –

Die Entwicklung der Drittmittel­einnahmen in den letzten 10 Jahren – für 2007 voraussichtliche Ist-Zahlen – lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

¹voraussichtliches Ist 2007 – vor Prüfung des Jahresabschlusses

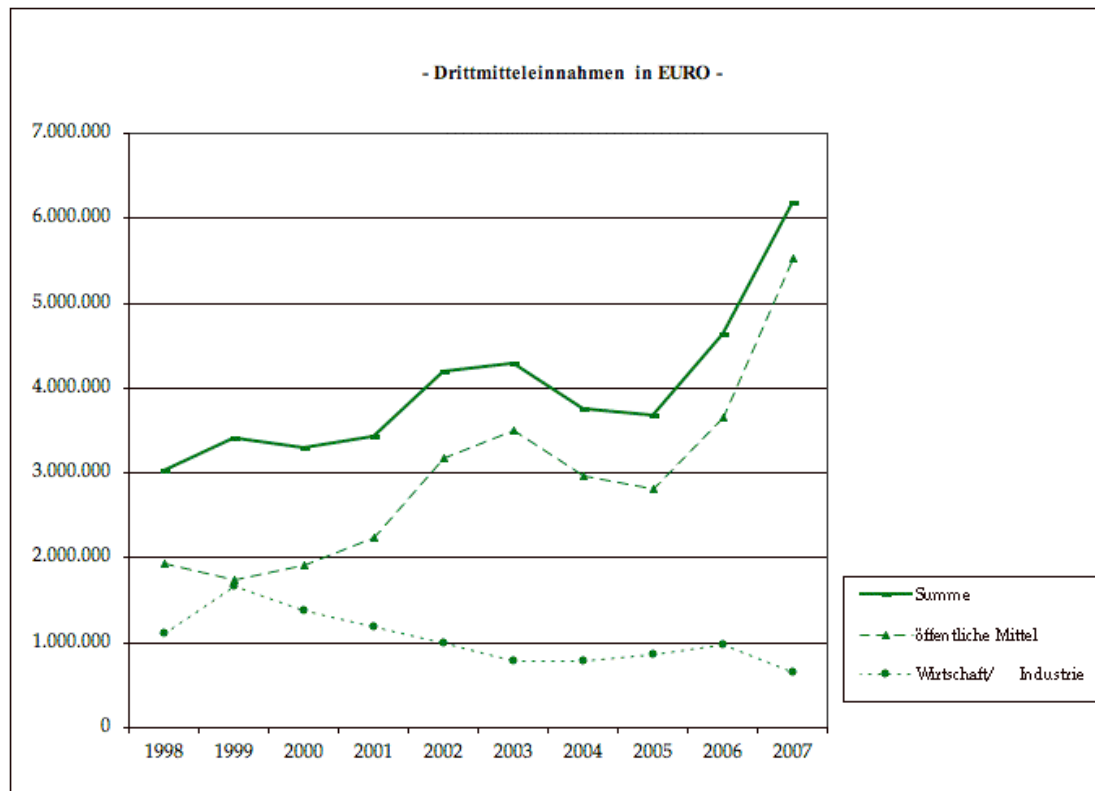


ABBILDUNG 7.1: Drittmittel-Entwicklung.

7.8 Spin-off-Firmen

Mitarbeiter des ZIB haben in den letzten Jahren die folgenden Firmen gegründet:

- Computing in Technology (CIT) GmbH – 1992
Modellierung und Entwicklung von numerischer Software für die technische Chemie
<http://www.cit-wulkow.de>
- RISK-CONSULTING Prof. Dr. Weyer GmbH – 1994
Database Marketing für Versicherungen
<http://www.risk-consulting.de>
- Intranetz GmbH – 1996
Softwareentwicklung für Logistik, DatabasePublishing, eGovernment
<http://www.intranetz.de>
- AktuarData GmbH – 1998
Entwicklung und Vertrieb von Risikobewertungssystemen zur Krankenversicherung
<http://www.aktuardata.de>

- Indeed-Visual Concepts GmbH/Mercury Computer Systems GmbH/Visage Imaging GmbH – 1999
Integrierte Softwareumgebungen (Amira etc.), Virtual Reality System Integration
<http://www.visageimaging.com>
- atesio GmbH – 2000
Entwicklung von Software und Dienstleistung für die Planung, Konfiguration und Optimierung von Telekommunikationsnetzen
<http://www.atesio.de>
- Dres. Löbel, Borndörfer & Weider GbR – 2000
Optimierung und Unternehmensberatung im ÖPNV
<http://www.lbw-berlin.de>
- JCMwave GmbH – 2002
Simulationssoftware für optische Komponenten
<http://www.jcmwave.com>
- Lenné3D GmbH – 2005
3D-Landschaftsvisualisierung, Softwareentwicklung und Dienstleistungen
<http://www.lenne3d.com>
- onScale solutions GmbH – 2006
Softwareentwicklung, Beratung und Dienstleistungen für parallele und verteilte Speicher- und Rechnersysteme
<http://www.onscale.de>

7.9 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (80,5 Stellen, – 6 Beamten- und 74,5 Angestelltenstellen – davon 2 Stellen ohne Bezüge und eine 1,5-Stelle durch Wegfallvermerk nicht finanziert) sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die deutlich über dem Durchschnitt liegenden Altersstruktur der unbefristet beschäftigten Belegschaft besteht im Personalhaushalt eine besondere finanzielle Belastung, die bisher durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmitteleinnahmen abgedeckt werden konnte. Im Hinblick auf die erhebliche Steigerung der vom Arbeitgeber aufzubringenden Umlage für das VBL-Sanierungsgeld und der dadurch entstandenen Mehrbelastung des ZIB-Haushalts ist ein teilweiser Ausgleich durch Erhöhung des Landeszuschusses ab 2008 zu erwarten.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.2007	01.01.2008
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	82	89
Servicepersonal	47	45
KOBV-Zentrale	14	15
Studentische Hilfskräfte	45	55
Insgesamt	192	208

ABBILDUNG 7.2: Personal-Entwicklung.

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2008 insgesamt 109 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 99 Beschäftigte finanziert.

KAPITEL 8

ANSPRECHPARTNER

Präsident: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls *Scientific Computing*
am Fachbereich Mathematik und Informatik
der Freien Universität Berlin
Tel. (030) 841 85-101

Vizepräsident: Prof. Dr. Drs. h.c. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls *Diskrete Mathematik*
am Institut für Mathematik
der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 841 85-210

Bereichsleiter Prof. Dr. Alexander Reinefeld
Computer Science: Inhaber des Lehrstuhls *Praktische Informatik*
am Institut für Informatik
der Humboldt-Universität zu Berlin
Tel. (030) 841 85-130

Bereichsleiter Henry Thieme
Verwaltung: Tel. (030) 841 85-100

Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard/ Dr. Martin Weiser	841 85-101 841 85-170
Visualisierung & Datenanalyse:	Hans-Christian Hege	841 85-141
Optimierung:	Prof. Dr. Drs. h.c. Martin Grötschel/ Dr. Ralf Borndörfer	841 85-210 841 85-243
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85-173
Computer Science Research: High Performance	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	841 85-130

Computing:	Hubert Busch	841 85-135
IT Services:	Wolfgang Pyszkalski	841 85-152
Bibliothek:	Regine Kossick	841 85-233

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Takustraße 7

14195 Berlin-Dahlem

Telefon: (030) 841 85-0

Telefax: (030) 841 85-125

Internet: <http://www.zib.de>

E-Mail: nachname@zib.de

ANHANG A: ÜBERSICHT PREPRINTS

ZIB-Report 07-01. Michael Zilske; Hans Lamecker; Stefan Zachow. *Adaptive Remeshing of Non-Manifold Surfaces.*

Abstract: We present a unified approach for consistent remeshing of arbitrary non-manifold triangle meshes with additional user-defined feature lines, which together form a feature skeleton. Our method is based on local operations only and produces meshes of high regularity and triangle quality while preserving the geometry as well as topology of the feature skeleton and the input mesh.

ZIB-Report 07-02. Ralf Borndörfer; Thomas Schlechte. *Models for Railway Track Allocation.*

Abstract: The optimal track allocation problem (OPTRA) is to find, in a given railway network, a conflict-free set of train routes of maximum value. We study two types of integer programming formulations for this problem: a standard formulation that models block conflicts in terms of packing constraints, and a novel formulation of the “extended” type that is based on additional “configuration” variables. The packing constraints in the standard formulation stem from an interval graph and can therefore be separated in polynomial time. It follows that the LP-relaxation of a strong version of this model, including all clique inequalities from block conflicts, can be solved in polynomial time. We prove that the LP-relaxation of the extended formulation can also be solved in polynomial time, and that it produces the same LP-bound. Albeit the two formulations are in this sense equivalent, the extended formulation has advantages from a computational point of view. It features a constant number of rows and is amenable to standard column generation techniques. Results of an empirical model comparison on mesoscopic data for the Hanover-Fulda-Kassel region of the German long distance railway network involving up to 570 trains are reported.

ZIB-Report 07-03. Marcus Weber; Susanna Kube; Alexander Riemer; Alexander Bujotzek. *Efficient Sampling of the Stationary Distribution of Metastable Dynamical Systems.*

Abstract: This article deals with an efficient sampling of the stationary distribution of dynamical systems in the presence of metastabilities. For such systems, standard sampling schemes suffer from trapping problems and critical slowing down. Starting multiple trajectories in different regions of the sampling space is a promising way out. The different samplings represent the stationary distribution locally very well, but are still far away from ergodicity or from the global stationary distribution. We will show how these samplings can be joined together in order to get one global sampling of the stationary distribution.

ZIB-Report 07-04. Peter Deuffhard; Wilhelm Huisinga; Tobias Jahnke; Michael Wulkow. *Adaptive Discrete Galerkin Methods Applied to the Chemical Master Equation.*

Abstract: In systems biology, the stochastic description of biochemical reaction kinetics is increasingly being employed to model gene regulatory networks and signalling pathways. Mathematically speaking, such models require the numerical solution of the underlying evolution equation, also known as the chemical master equation (CME). Up to now, the CME has almost exclusively been treated by Monte-Carlo techniques, the most prominent of which is the simulation algorithm suggested by Gillespie in 1976. The paper presents an alternative, which focuses on the discrete partial differential equati-

on (PDE) structure of the CME and thus allows to adopt ideas from adaptive discrete Galerkin methods as first suggested by Deuffhard and Wulkow in 1989 for polyreaction kinetics and independently redetected for the CME by Engblom in 2006. Among the two different options of discretizing the CME as a discrete PDE, Engblom had chosen the method of lines approach (first space, then time), whereas we strongly advise to use the Rothe method (first time, then space) for clear theoretical and algorithmic reasons. Numerical findings at two rather challenging problems illustrate the promising features of the proposed method and, at the same time, indicate lines of necessary further improvement of the method worked out here.

ZIB-Report 07-05. Sadegh Jokar; Marc E. Pfetsch. *Exact and Approximate Sparse Solutions of Underdetermined Linear Equations.*

Abstract: In this paper, we empirically investigate the NP-hard problem of finding sparse solutions to linear equation systems, i.e., solutions with as few nonzeros as possible. This problem has received considerable interest in the sparse approximation and signal processing literature, recently. We use a branch-and-cut approach via the maximum feasible subsystem problem to compute optimal solutions for small instances and investigate the uniqueness of the optimal solutions. We furthermore discuss five (modifications of) heuristics for this problem that appear in different parts of the literature. For small instances, the exact optimal solutions allow us to evaluate the quality of the heuristics, while for larger instances we compare their relative performance. One outcome is that the basis pursuit heuristic performs worse, compared to the other methods. Among the best heuristics are a method due to Mangasarian and a bilinear approach.

ZIB-Report 07-06. Andreas Imhof. *Zweieinhalb Jahre Open-Linking im KOBV-Portal: Ein Erfahrungsbericht.*

Zusammenfassung: Seit Januar 2004 betreibt die Zentrale des Kooperativen Bibliotheksverbunds Berlin-Brandenburg (KOBV) das KOBV-Portal, in dem u. a. vielfältige Open-Linking-Dienste eingebunden sind. Dieser Beitrag erläutert Open-Linking allgemein und stellt die KOBV spezifischen Dienste im Detail vor. Dabei wird auch die Zugriffsentwicklung auf die KOBV-Open-Linking-Dienste evaluiert. Ein Ergebnis ist, dass signifikante Steigerungen der Nutzung erst dann bewirkt werden, wenn Maßnahmen durchgeführt werden, die erstens die Open-Linking-Dienste stärker ins Bewusstsein der NutzerInnen rücken und zweitens den Weg dorthin im KOBV-Portal verkürzen. Vor allem muss ein schneller Weg zu den Open-Linking-Diensten gewährleistet sein, um die Nutzung deutlich zu steigern. Um zusätzlich den Bekanntheitsgrad der Open-Linking-Dienste bundesweit zu erhöhen, regt die KOBV-Zentrale andere Bibliotheken und Verbände dazu an, analoge Open-Linking-Dienste einzurichten. Auf diese Weise wird die Handhabung von Open-Linking selbstverständlicher.

ZIB-Report 07-07. Anton Schiela. *Barrier Methods for Optimal Control Problems with State Constraints.*

Abstract: We study barrier methods for state constrained optimal control problems with PDEs. In the focus of our analysis is the path of minimizers of the barrier subproblems with the aim to provide a solid theoretical basis for function space oriented path-following algorithms. We establish results on existence, continuity and convergence of this path. Moreover, we consider the structure of barrier subdifferentials, which play the role of dual variables.

ZIB-Report 07-08. Christian Raack; Arie M. C. A. Koster; Roland Wessälly. *On the strength of cut-based inequalities for capacitated network design polyhedra.*

Abstract: In this paper we study capacitated network design problems, differentiating directed, bidirected and undirected link capacity models. We complement existing polyhedral results for the three variants by new classes of facet-defining valid inequalities and unified lifting results. For this, we study the restriction of the problems to a cut

of the network. First, we show that facets of the resulting cutset polyhedra translate into facets of the original network design polyhedra if the two subgraphs defined by the network cut are (strongly) connected. Second, we provide an analysis of the facial structure of cutset polyhedra, elaborating the differences caused by the three different types of capacity constraints. We present flow-cutset inequalities for all three models and show under which conditions these are facet-defining. We also state a new class of facets for the bidirected and undirected case and it is shown how to handle multiple capacity modules by Mixed Integer Rounding (MIR).

ZIB-Report 07-09. Peter Deuffhard; Ulrich Nowak; Brigitte Lutz-Westphal. *Bessel'scher Irrgarten.*

Zusammenfassung: Dieser Artikel berichtet über eine erfolgreiche Schüleraktivität, die seit Jahren am Zuse-Institut Berlin (ZIB) bei Besuchen von Schülergruppen erprobt und verfeinert worden ist. Das hier zusammengestellte Material ist gedacht als Basis für eine Unterrichtseinheit in Leistungskursen Mathematik an Gymnasien. Inhaltlich wird von einem zwar für Schüler (wie auch Lehrer) neuen, aber leicht fasslichen Gegenstand ausgegangen: der Drei-Term-Rekursion für Besselfunktionen. Die Struktur wird erklärt und in ein kleines Programm umgesetzt. Dazu teilen sich die Schüler selbstorganisierend in Gruppen ein, die mit unterschiedlichen Taschenrechnern „um die Wette“ rechnen. Die Schüler und Schülerinnen erfahren unmittelbar die katastrophale Wirkung von an sich „kleinen“ Rundungsfehlern, sie landen – ebenso wie der Supercomputer des ZIB – im „Bessel'schen Irrgarten“. Die auftretenden Phänomene werden mathematisch elementar erklärt, wobei lediglich auf das Konzept der linearen Unabhängigkeit zurückgegriffen wird.

Das dabei gewonnene vertiefte Verständnis fließt ein in die Konstruktion eines klassischen Algorithmus sowie eines wesentlich verbesserten Horner-artigen Algorithmus.

ZIB-Report 07-10. Arie M. C. A. Koster; Adrian Zymolka; Manuel Kutschka. *Algorithms to Separate $0,1/2$ -Chvátal-Gomory Cuts.*

Abstract: Chvátal-Gomory cuts are among the most well-known classes of cutting planes for general integer linear programs (ILPs). In case the constraint multipliers are either 0 or $\frac{1}{2}$, such cuts are known as $\{0, \frac{1}{2}\}$ -cuts. It has been proven by Caprara and Fischetti (1996) that separation of $\{0, \frac{1}{2}\}$ -cuts is NP-hard.

In this paper, we study ways to separate $\{0, \frac{1}{2}\}$ -cuts effectively in practice. We propose a range of preprocessing rules to reduce the size of the separation problem. The core of the preprocessing builds a Gaussian elimination-like procedure. To separate the most violated $\{0, \frac{1}{2}\}$ -cut, we formulate the (reduced) problem as integer linear program. Some simple heuristic separation routines complete the algorithmic framework.

Computational experiments on benchmark instances show that the combination of preprocessing with exact and/or heuristic separation is a very vital idea to generate strong generic cutting planes for integer linear programs and to reduce the overall computation times of state-of-the-art ILP-solvers.

ZIB-Report 07-11. Hans-Florian Geerdes; Andreas Eisenblätter. *Reconciling Theory and Practice: A Revised Pole Equation for W-CDMA Cell Powers.*

Abstract: The performance evaluation of W-CDMA networks is intricate as cells are strongly coupled through interference. Pole equations have been developed as a simple tool to analyze cell capacity. Numerous scientific contributions have been made on their basis. In the established forms, the pole equations rely on strong assumptions such as homogeneous traffic, uniform users, and constant downlink orthogonality factor. These assumptions are not met in realistic scenarios. Hence, the pole equations are typically used during initial network dimensioning only. Actual network (fine-) planning requires a more faithful analysis of each individual cell's capacity. Complex analytical analysis or Monte-Carlo simulations are used for this purposes.

In this paper, we generalize the pole equations to include inhomogeneous data. We show how the equations can be parametrized in a cell-specific way provided the transmit powers are known. This allows to carry over prior results to realistic settings. This is illustrated with an example: Based on the pole equation, we investigate the accuracy of “average snapshot” approximations for downlink transmit powers used in state-of-the-art network optimization schemes. We confirm that the analytical insights apply to practice-relevant settings on the basis of results from detailed Monte-Carlo simulation on realistic datasets.

ZIB-Report 07-12. Daniel Ruprecht; Achim Schädle; Frank Schmidt and Lin Zschiedrich. *Transparent boundary conditions for time-dependent problems.*

Abstract: A new approach to derive transparent boundary conditions (TBCs) for wave, Schrödinger, heat and drift-diffusion equations is presented. It relies on the pole condition and distinguishes between physical reasonable and unreasonable solutions by the location of the singularities of the spatial Laplace transform of the exterior solution. To obtain a numerical algorithm, a Möbius transform is applied to map the Laplace transform onto the unit disc. In the transformed coordinate the solution is expanded into a power series. Finally, equations for the coefficients of the power series are derived. These are coupled to the equation in the interior, and yield transparent boundary conditions.

Numerical results are presented in the last section, showing that the error introduced by the new approximate TBCs decays exponentially in the number of coefficients.

ZIB-Report 07-13. Stefan Vater; Rupert Klein. *Stability of a Cartesian Grid Projection Method for Zero Froude Number Shallow Water Flows.*

Abstract: In this paper a Godunov-type projection method for computing approximate solutions of the zero Froude number (incompressible) shallow water equations is presented. It is second-order accurate and locally conserves height (mass) and momentum. To enforce the underlying divergence constraint on the velocity field, the predicted numerical fluxes, computed with a standard second order method for hyperbolic conservation laws, are corrected in two steps. First, a MAC-type projection adjusts the advective velocity divergence. In a second projection step, additional momentum flux corrections are computed to obtain new time level cell-centered velocities, which satisfy another discrete version of the divergence constraint.

The scheme features an exact and stable second projection. It is obtained by a Petrov-Galerkin finite element ansatz with piecewise bilinear trial functions for the unknown incompressible height and piecewise constant test functions. The stability of the projection is proved using the theory of generalized mixed finite elements, which goes back to Nicolaïdes (1982). In order to do so, the validity of three different inf-sup conditions has to be shown.

Since the zero Froude number shallow water equations have the same mathematical structure as the incompressible Euler equations of isentropic gas dynamics, the method can be easily transferred to the computation of incompressible variable density flow problems.

ZIB-Report 07-14. Christian Raack; Arie M.C.A. Koster; Sebastian Orlowski; Roland Wessäly. *Capacitated network design using general flow-cutset inequalities.*

Abstract: This paper deals with directed, bidirected, and undirected capacitated network design problems. Using mixed integer rounding (MIR), we generalize flow-cutset inequalities to these three link types and to an arbitrary modular link capacity structure, and propose a generic separation algorithm. In an extensive computational study on 54 instances from the Survivable Network Design Library (SNDlib), we show that the performance of cplex can significantly be enhanced by this class of cutting planes. The computations reveal the particular importance of the subclass of cutset-inequalities.

ZIB-Report 07-15. Sebastian Orlowski; Michael Pióro; Artur Tomaszewski; Roland Wessäly. *SNDlib 1.0–Survivable Network Design Library.*

Abstract: We provide information on the Survivable Network Design Library (SNDlib), a data library for fixed telecommunication network design that can be accessed at <http://sndlib.zib.de>. In version 1.0, the library contains data related to 22 networks which, combined with a set of selected planning parameters, leads to 830 network planning problem instances. In this paper, we provide a mathematical model for each planning problem considered in the library and describe the data concepts of the SNDlib. Furthermore, we provide statistical information and details about the origin of the data sets.

ZIB-Report 07-16. Tobias Harks; Stefan Heinz; Marc E. Pfetsch. *Competitive Online Multicommodity Routing.*

Abstract: In this paper we study online multicommodity routing problems in networks, in which commodities have to be routed sequentially. The flow of each commodity can be split on several paths. Arcs are equipped with load dependent price functions defining routing costs, which have to be minimized. We discuss a greedy online algorithm that routes each commodity by minimizing a convex cost function that only depends on the demands previously routed. We present a competitive analysis of this algorithm showing that for affine linear price functions this algorithm is $\frac{4K^2}{(1+K)^2}$ -competitive, where K is the number of commodities. For the single-source single-destination case, this algorithm is optimal. Without restrictions on the price functions and network, no algorithm is competitive. Finally, we investigate a variant in which the demands have to be routed unsplitably.

ZIB-Report 07-17. Susanna Kube; Caroline Lasser; Marcus Weber. *Monte Carlo sampling of Wigner functions and surface hopping quantum dynamics.*

Abstract: Wigner functions are functions on classical phase space, which are in one-to-one correspondence to square integrable functions on configuration space. For molecular quantum systems, classical transport of Wigner functions provides the basis of asymptotic approximation methods in the high energy regime. The article addresses the sampling of Wigner functions by Monte Carlo techniques. The approximation step is realized by an adaption of the Metropolis algorithm for real-valued functions with disconnected support. The quadrature, which computes values of the Wigner function, uses importance sampling with a Gaussian weight function. The numerical experiments combine the sampling with a surface hopping algorithm for non-adiabatic quantum dynamics. In agreement with theoretical considerations, the obtained results show an accuracy of two to four percent.

ZIB-Report 07-18. Marcus Weber. *Conformation-Based Transition State Theory.*

Abstract: For the treatment of equilibrated molecular systems in a heat bath we propose a transition state theory that is based on conformation dynamics. In general, a set-based discretization of a Markov operator \mathcal{P}^τ does not preserve the Markov property. In this article, we propose a discretization method which is based on a Galerkin approach. This discretization method preserves the Markov property of the operator and can be interpreted as a decomposition of the state space into (fuzzy) sets. The conformation-based transition state theory presented here can be seen as a first step in conformation dynamics towards the computation of essential dynamical properties of molecular systems without time-consuming molecular dynamics simulations.

ZIB-Report 07-19. (nicht erschienen)

ZIB-Report 07-20. Ralf Borndörfer; Thomas Schlechte. *Solving Railway Track Allocation Problems.*

Abstract: The *optimal track allocation problem* (OPTRA), also known as the train routing problem or the train timetabling problem, is to find, in a given railway network, a conflict-free set of train routes of maximum value. We propose a novel integer program-

ming formulation for this problem that is based on additional ‘configuration’ variables. Its LP-relaxation can be solved in polynomial time. These results are the theoretical basis for a column generation algorithm to solve large-scale track allocation problems. Computational results for the Hanover-Kassel-Fulda area of the German long distance railway network involving up to 570 trains are reported.

ZIB-Report 07-21. Arie M.C.A. Koster; Sebastian Orlowski; Christian Raack; Georg Baier; Thomas Engel. *Single-layer Cuts for Multi-layer Network Design Problems*.

Abstract: We study a planning problem arising in SDH/WDM multi-layer telecommunication network design. The goal is to find a minimum cost installation of link and node hardware of both network layers such that traffic demands can be realized via grooming and a survivable routing. We present a mixed-integer programming formulation that takes many practical side constraints into account, including node hardware, several bitrates, and survivability against single physical node or link failures. This model is solved using a branch-and-cut approach with problem-specific preprocessing and cutting planes based on either of the two layers. On several realistic two-layer planning scenarios, we show that these cutting planes are still useful in the multi-layer context, helping to increase the dual bound and to reduce the optimality gaps.

ZIB-Report 07-22. Tobias Harks; Stefan Heinz; Marc E. Pfetsch; Tjark Vredeveld. *Online Multicommodity Routing with Time Windows*.

Abstract: We consider a multicommodity routing problem, where demands are released *online* and have to be routed in a network during specified time windows. The objective is to minimize a time and load dependent convex cost function of the aggregate arc flow. First, we study the fractional routing variant. We present two online algorithms, called Seq and Seq². Our first main result states that, for cost functions defined by polynomial price functions with nonnegative coefficients and maximum degree d , the competitive ratio of Seq and Seq² is at most $(d+1)^{d+1}$, which is tight. We also present lower bounds of $(0.265(d+1))^{d+1}$ for any online algorithm. In the case of a network with two nodes and parallel arcs, we prove a lower bound of $(2 - \frac{1}{2}\sqrt{3})$ on the competitive ratio for Seq and Seq², even for affine linear price functions. Furthermore, we study resource augmentation, where the online algorithm has to route less demand than the offline adversary. Second, we consider unsplittable routings. For this setting, we present two online algorithms, called U-Seq and U-Seq². We prove that for polynomial price functions with nonnegative coefficients and maximum degree d , the competitive ratio of U-Seq and U-Seq² is bounded by $O(1.77^d d^{d+1})$. We present lower bounds of $(0.5307(d+1))^{d+1}$ for any online algorithm and $(d+1)^{d+1}$ for our algorithms.

Third, we consider a special case of our framework: online load balancing in the ℓ_p -norm. For the fractional and unsplittable variant of this problem, we show that our online algorithms are p and Op competitive, respectively. Such results were previously known only for scheduling jobs on restricted (un)related parallel machines.

ZIB-Report 07-23. Alexander Reinefeld; Florian Schintke; Thorsten Schütt. *P2P Routing of Range Queries in Skewed Multidimensional Data Sets*.

Abstract: We present a middleware to store multidimensional data sets on Internet-scale distributed systems and to efficiently perform range queries on them. Our structured overlay network *SONAR* (*Structured Overlay Network with Arbitrary Range queries*) puts keys which are adjacent in the key space on logically adjacent nodes in the overlay and is thereby able to process multidimensional range queries with a single logarithmic data lookup and local forwarding. The specified ranges may have arbitrary shapes like rectangles, circles, spheres or polygons.

Empirical results demonstrate the routing performance of SONAR on several data sets, ranging from real-world data to artificially constructed worst case distributions. We study the quality of SONAR’s routing information which is based on local knowledge only and

measure the indegree of the overlay nodes to find potential hot spots in the routing process. We show that SONAR's routing table is self-adjusting, even under extreme situations, keeping always a maximum of $\lceil \log N \rceil$ routing entries.

ZIB-Report 07-24. Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Die Wissenschaftsgalaxis: Wie soll die zukünftige wissenschaftliche Informationsversorgung aussehen?*

Zusammenfassung: Wissenschaftler sind an qualitativ hochwertiger Information interessiert, selten an Informationsversorgung selbst. Es ist ihnen in Fragen der Organisation meistens egal, von welchem Versorger sie das Material, das sie benötigen, bekommen. Sie wollen einfach nur alles, was sie brauchen, jederzeit, überall, sofort und möglichst kostengünstig oder gar kostenlos haben. Im Prinzip ist das möglich. Seit mindestens zehn Jahren werden so gut wie alle wissenschaftlichen Dokumente (Artikel, Messdaten, ...) elektronisch erstellt. Eigentlich bräuchte man diese nur ins Internet zu stellen, und damit wäre alles verfügbar. Irgendwie funktioniert diese einfache Idee nicht so richtig, obwohl viele Anstrengungen von den verschiedensten Einrichtungen und Individuen unternommen werden, z. B. durch Open-Access-Bemühungen. Was sind die Gründe dafür? Die Fortschritte beim schnellen Zugriff auf Information im Internet sind atemberaubend (siehe *Google*), dennoch ist der zielgerichtete Zugriff auf wissenschaftlich relevante Information weiterhin nur oberflächlich vorhanden. Die Hindernisse sind vielfältiger Natur: Bequemlichkeit und Unwissen der Autoren, Gewohnheiten der Nutzer und Informationsvermittler, Barrieren durch Copyrights und Verlagsstrategien, Eitelkeiten. In diesem Artikel werden einige der Probleme erläutert, die dem Traum des Aufbaus der wissenschaftlichen Universalbibliothek entgegenstehen. Gleichzeitig wird skizziert, wie man auf dem Weg zur Verwirklichung des Traums ein Stück vorankommen und wie die zukünftige wissenschaftliche Informationsversorgung gestaltet werden kann.

ZIB-Report 07-25. Volker Kaibel; Rüdiger Stephan. *On cardinality constrained cycle and path polytopes.*

Abstract: Given a directed graph $D = (N, A)$ and a sequence of positive integers $1 \leq c_1 \leq c_2 \leq \dots \leq c_m \leq |N|$, we consider those path and cycle polytopes that are defined as the convex hulls of simple paths and cycles of D of cardinality c_p for some $p \in \{1, \dots, m\}$, respectively. We present integer characterizations of these polytopes by facet defining linear inequalities for which the separation problem can be solved in polynomial time. These inequalities can simply be transformed into inequalities that characterize the integer points of the undirected counterparts of cardinality constrained path and cycle polytopes. Beyond we investigate some further inequalities, in particular inequalities that are specific to odd/even paths and cycles.

ZIB-Report 07-26. Benjamin Hiller; Andreas Tuchscherer. *Real-Time Destination-Call Elevator Group Control on Embedded Microcontrollers.*

Abstract: Algorithmic control of elevator systems has been studied for a long time. More recently, a new paradigm for elevator control has emerged. In destination call systems, the passenger specifies not only the direction of his ride, but the destination floor. Such a destination call system is very interesting from an optimization point of view, since more information is available earlier, which should allow improved planning. However, the real-world destination call system envisioned by our industry partner requires that each destination call (i.e. passenger) is assigned to a serving elevator immediately. This early assignment restricts the potential gained from the destination information. Another aspect is that there is no way to specify the destination floor in the cabin. Therefore, the elevator has to stop on every destination floor of an assigned call, although the passenger may not have boarded the cabin, e.g. due to insufficient capacity. In this paper we introduce a new destination call control algorithm suited to this setting. Since the control algorithm for an entire elevator group has to run on embedded microprocessors, computing resources are very scarce. Since exact optimization is not feasible

on such hardware, the algorithm is an insertion heuristic using a non-trivial data structure to maintain a set of tours.

To assess the performance of our algorithm, we compare it to similar and more powerful algorithms by simulation. We also compare to algorithms for a conventional system and with a more idealized destination call system. This gives an indication of the relative potentials of these systems. In particular, we assess how the above real-world restrictions influence performance.

The algorithm introduced has been implemented by our industry partner for real-world use.

ZIB-Report 07-27. Beate Rusch; Barbara Block; Josef Labner. *Katalogisierung kooperativ gemacht.*

Abstract: Bereits seit den siebziger Jahren katalogisieren Bibliotheken arbeitsteilig in Verbänden. Allerdings macht die Kooperation bislang oftmals an den Grenzen traditionell gewachsener Verbundstrukturen halt. Das ist ein Grund dafür, dass in Deutschland und Österreich das gleiche Buch im schlimmsten Fall an zahlreichen Stellen gleichzeitig katalogisiert wird, ohne dass der eine von der Arbeit des anderen profitiert. In dem folgenden Report werden erstmals konkrete Schritte beschrieben, die eine verteilte Katalogisierung über Verbundgrenzen hinweg verbessern. Dazu gehören Vereinbarungen für die Indexierung und die Suche über Z39.50, Regeln für gegenseitige Datenlieferungen und nicht zuletzt die Einführung einer eindeutigen Identifikationsnummer, die die erstkatalogisierende Institution vergibt.

Der vorliegende Artikel ist ein vorläufiger Zwischenbericht der von der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme eingesetzten Arbeitsgruppe „Kooperative Neukatalogisierung“.

ZIB-Report 07-28. Timo Berthold. *RENS - Relaxation Enforced Neighborhood Search.*

Abstract: In the recent years, a couple of quite successful large neighborhood search heuristics for mixed integer programs has been published. Up to our knowledge, all of them are improvement heuristics. We present a new start heuristic for general MIPs working in the spirit of large neighborhood search. It constructs a sub-MIP which represents the space of all feasible roundings of some fractional point – normally the optimum of the LP-relaxation of the original MIP. Thereby, one is able to determine whether a point can be rounded to a feasible solution and which is the best possible rounding. Furthermore, a slightly modified version of RENS proves to be a well-performing heuristic inside the branch-cut-and-price-framework SCIP.

ZIB-Report 07-29. Ralf Borndörfer; Christian Liebchen. *When Periodic Timetables are Suboptimal.*

Abstract: „The timetable is the essence of the service offered by any provider of public transport“ (Jonathan Tyler, CASPT 2006). Indeed, the timetable has a major impact on both operating costs and on passenger comfort. Most European agglomerations and railways use periodic timetables in which operation repeats in regular intervals. In contrast, many North and South American municipalities use trip timetables in which the vehicle trips are scheduled individually subject to frequency constraints. We compare these two strategies with respect to vehicle operation costs. It turns out that for short time horizons, periodic timetabling can be suboptimal; for sufficiently long time horizons, however, periodic timetabling can always be done “in an optimal way”.

ZIB-Report 07-30. Timo Berthold. *Heuristics of the Branch-Cut-and-Price-Framework SCIP.*

Abstract: In this paper we give an overview of the heuristics which are integrated into the open source branch-cut-and-price-framework SCIP. We briefly describe the fundamental ideas of different categories of heuristics and present some computational results which demonstrate the impact of heuristics on the overall solving process of SCIP.

ZIB-Report 07-31. Marcus Weber; Roland Becker; Robert Köppen; Vedat Durmaz. *Classi-*

cal hybrid Monte-Carlo simulations of the interconversion of hexabromocyclododecane.

Abstract: In this paper, we investigate the interconversion processes of the major flame retardant – 1,2,5,6,9,10-hexabromocyclododecane (HBCD) – by the means of statistical thermodynamics based on classical force-fields. Three ideas will be presented. First, the application of classical hybrid Monte-Carlo simulations for quantum mechanical processes will be justified. Second, the problem of insufficient convergence properties of hybrid Monte-Carlo methods for the generation of low temperature canonical ensembles will be solved by an interpolation approach. Furthermore, it will be shown how free energy differences can be used for a rate matrix computation. The results of our numerical simulations will be compared to experimental results.

ZIB-Report 07-32. Olaf Schenk; Andreas Wächter; Martin Weiser. *Inertia Revealing Preconditioning For Large-Scale Nonconvex Constrained Optimization.*

Abstract: Fast nonlinear programming methods following the all-at-once approach usually employ Newton's method for solving linearized Karush-Kuhn-Tucker (KKT) systems. In nonconvex problems, the Newton direction is only guaranteed to be a descent direction if the Hessian of the Lagrange function is positive definite on the nullspace of the active constraints, otherwise some modifications to Newton's method are necessary. This condition can be verified using the signs of the KKT's eigenvalues (inertia), which are usually available from direct solvers for the arising linear saddle point problems. Iterative solvers are mandatory for very large-scale problems, but in general do not provide the inertia. Here we present a preconditioner based on a multilevel incomplete LBL^T factorization, from which an approximation of the inertia can be obtained. The suitability of the heuristics for application in optimization methods is verified on an interior point method applied to the CUTE and COPS test problems, on large-scale 3D PDE-constrained optimal control problems, as well as 3D PDE-constrained optimization in biomedical cancer hyperthermia treatment planning. The efficiency of the preconditioner is demonstrated on convex and nonconvex problems with 150^3 state variables and 150^2 control variables, both subject to bound constraints..

ZIB-Report 07-33. Andreas Bley. *Routing and Capacity Optimization for IP Networks.*

Abstract: This article describes the main concepts and techniques that have been developed during the last year at ZIB to solve dimensioning and routing optimization problems for IP networks. We discuss the problem of deciding if a given path set corresponds to an unsplittable shortest path routing, the fundamental properties of such path sets, and the computational complexity of some basic network planning problems for this routing type. Then we describe an integer-linear programming approach to solve such problems in practice. This approach has been used successfully in the planning of the German national education and research network for several years.

ZIB-Report 07-34. Xavier Antoine; Anton Arnold; Christophe Besse; Matthias Ehrhardt; Achim Schädle. *A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations.*

Abstract: In this review article we discuss different techniques to solve numerically the time-dependent Schrödinger equation on unbounded domains.

We present in detail the most recent approaches and describe briefly alternative ideas pointing out the relations between these works.

We conclude with several numerical examples from different application areas to compare the presented techniques. We mainly focus on the one-dimensional problem but also touch upon the situation in two space dimensions and the cubic nonlinear case.

ZIB-Report 07-35. Anton Schiela. *Optimality Conditions for Convex State Constrained Optimal Control Problems with Discontinuous States.*

Abstract: We discuss first order optimality conditions for convex state constrained optimal control problems. Our concern is the treatment of problems, where the solution

of the state equation is not known to be continuous, as in the case of boundary control in three space dimensions or optimal control with parabolic partial differential equations. Our main tool will be a variant of the sum-rule in convex analysis. We show existence of measure valued Lagrangian multipliers, which have just enough additional regularity to be applicable to all possibly discontinuous solutions of the state equation.

ZIB-Report 07-36. Martin Grötschel; Benjamin Hiller; Andreas Tuchscherer. *Combinatorial Online Optimization: Elevators & Yellow Angels*.

Abstract: In *classical optimization* it is assumed that full information about the problem to be solved is given. This, in particular, includes that all data are at hand. The real world may not be so nice” to optimizers. Some problem constraints may not be known, the data may be corrupted, or some data may not be available at the moments when decisions have to be made. The last issue is the subject of *online optimization* which will be addressed here. We explain some theory that has been developed to cope with such situations and provide examples from practice where unavailable information is not the result of bad data handling but an inevitable phenomenon.

ZIB-Report 07-37. Tobias Achterberg; Raik Brinkmann; Markus Wedler. *Property Checking with Constraint Programming*.

Abstract: We address the property checking problem for SoC design verification at the register transfer level (RTL) by integrating techniques from integer programming, constraint programming, and SAT solving. Specialized domain propagation and preprocessing algorithms for individual RTL operations extend a general constraint integer programming framework. Conflict clauses are learned by analyzing infeasible LPs and deductions, and by employing reverse propagation. Experimental results show that our approach outperforms SAT techniques for proving the validity of properties on circuits containing arithmetics.

ZIB-Report 07-38. Hildegard Frank; Monika Kuberek; Stefan Lohrum; Gunnar Maiwald; Raluca Radu. *Automatisierte Fernleihe im KOBV-Handbuch für Bibliotheken – 2. Auflage*.

Zusammenfassung: Im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wird für die automatisierte Fernleihe der Zentrale-Fernleihserver (ZFL-Server) der Firma Sisis eingesetzt. Die Software ist in der KOBV-Zentrale installiert. Der ZFL-Server dient im KOBV sowohl für die Bestellung von Monographien als auch für die Bestellung von Aufsatzkopien aus Zeitschriften. Prinzipiell gibt es zwei Verfahren, mit denen sich Bibliotheken an der automatisierte Fernleihe beteiligen können: das E-Mail-Verfahren und das SLNP-Verfahren. Auf beide wird im Handbuch eingegangen.

Die automatisierte Fernleihe wurde im KOBV eingeführt, um die Fernleihe für die Benutzer zu beschleunigen, das Verfahren für die Bibliotheksmitarbeiter zu vereinfachen und den Arbeitsaufwand zu reduzieren. Sie basiert darauf, dass eine Bestellung anhand eines gefundenen Treffers ausgelöst wird – d.h. die bibliographischen Daten sind bereits verifiziert und in einem Katalog nachgewiesen. Anschließend werden die Fernleihbestellungen über den ZFL-Server automatisch ausgeführt und verwaltet – sowohl in der regionalen KOBV-Fernleihe als auch in der verbundübergreifenden Fernleihe mit den deutschen Bibliotheksverbänden. Der ZFL-Server besteht aus verschiedenen technischen Komponenten. Eine dieser Komponenten ist das Bibliothekskonto, eine Internetanwendung, in der die Bestellverwaltung des ZFL-Servers für die Bibliotheksbedienteten transparent gemacht wird.

Sowohl für die aktive als auch für die passive Fernleihe ist im Bibliothekskonto der Status der Bearbeitung zu jedem Zeitpunkt ersichtlich, z. B. in welcher Bibliothek sich die Bestellung gerade befindet, wann sie dort eingegangen ist und wann sie weggeschickt wurde, ob mit positivem oder negativem Ergebnis. Das Bibliothekskonto ist damit für die Bibliothek ein komfortables Instrument zum überwachen der Fernleihbestellungen,

in dem sie zudem falls notwendig in den Bestellvorgang eingreifen kann. Dazu hat jede Bibliothek im Bibliothekskonto eine eigene, Passwort-geschützte Dienstoberfläche.

Das vorliegende Handbuch beschreibt die Vorgänge der Bestellverwaltung im Bibliothekskonto. Es richtet sich an Bibliotheksmitarbeiter, die sich mit den einzelnen Arbeitsschritten der automatisierten Fernleihe vertraut machen wollen. Darüber hinaus ist es zum Nachschlagen gedacht, wenn sich in der täglichen Arbeit Unklarheiten ergeben.

ZIB-Report 07-39. Martin Grötschel; George L. Nemhauser. *George Dantzig's contributions to integer programming.*

Abstract: This paper reviews George Dantzig's contribution to integer programming, especially his seminal work with Fulkerson and Johnson on the traveling salesman problem.

ZIB-Report 07-40. Michael Hinze; Anton Schiela. *Discretization of Interior Point Methods for State Constrained Elliptic Optimal Control Problems: Optimal Error Estimates and Parameter Adjustment.*

Abstract: An adjustment scheme for the relaxation parameter of interior point approaches to the numerical solution of pointwise state constrained elliptic optimal control problems is introduced. The method is based on error estimates of an associated finite element discretization of the relaxed problems and optimally selects the relaxation parameter in dependence on the mesh size of discretization. The finite element analysis for the relaxed problems is carried out and a numerical example is presented which confirms our analytical findings.

ZIB-Report 07-41. Stefan Zachow; Michael Zilke; Hans-Christian Hege. *3D reconstruction of individual anatomy from medical image data: Segmentation and geometry processing.*

Abstract: For medical diagnosis, visualization, and model-based therapy planning three-dimensional geometric reconstructions of individual anatomical structures are often indispensable. Computer-assisted, model-based planning procedures typically cover specific modifications of virtual anatomy as well as numeric simulations of associated phenomena, like e.g. mechanical loads, fluid dynamics, or diffusion processes, in order to evaluate a potential therapeutic outcome. Since internal anatomical structures cannot be measured optically or mechanically in vivo, three-dimensional reconstruction of tomographic image data remains the method of choice. In this work the process chain of individual anatomy reconstruction is described which consists of segmentation of medical image data, geometrical reconstruction of all relevant tissue interfaces, up to the generation of geometric approximations (boundary surfaces and volumetric meshes) of three-dimensional anatomy being suited for finite element analysis. All results presented herein are generated with Amira[®], a highly interactive software system for 3D data analysis, visualization and geometry reconstruction.

ZIB-Report 07-42. Hubert Busch; Ursula Droebes; Marek Fröhlich; Christian Schimmel. *Das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN 2007.*

Zusammenfassung: Berlin als Stadtstaat ist Kommune und Land der Bundesrepublik zugleich und Standort vieler renommierter Wissenschafts- und Kultureinrichtungen. In enger Zusammenarbeit der Wissenschaftseinrichtungen mit dem IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ, ehemals Landesbetrieb für Informationstechnik), der für die Behörden Berlins zuständigen Einrichtung, wurde seit 1993 ein landeseigenes Glasfasernetz mit einer derzeitigen Länge von 856 km Glasfaserkabel (je Kabel bis zu 144 Einzelfasern) zur gemeinsamen Nutzung von Wissenschaft und Verwaltung errichtet und weiter ausgebaut. 1994 erfolgte der offizielle Start des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN (Berlin Research Area Information Network), als durch einen Beschluss des Senats von Berlin die Nutzung des landeseigenen Glasfasernetzes durch die Wissenschaftseinrichtungen festgeschrieben wurde. Bereits 1995 wurden durch die Wissenschaftseinrichtungen auf diesem Glasfasernetz die ersten sieben Anschlüsse in ATM-Technik (Classical BRAIN-ATM) in

Betrieb genommen, 1999 wurden anschließend auch erste Strecken in Ethernet-Technik (Classical BRAIN-GE) betrieben. Diese heterogenen Netze mit unterschiedlichen Netzgeräten wurden dezentral von den Netzadministratoren der beteiligten Einrichtungen nach globalen Absprachen betreut. Die dezentrale Administration erschwerte das Management und die Erweiterungen der Gesamtnetze. Basierend auf den vorliegenden Erfahrungen vereinbarten die Berliner Wissenschaftseinrichtungen, ein technisch neues Verbundnetz in Gigabit-Ethernet-Technik mit einheitlichen Geräten und einem zentralen Netzwerkmanagement aufzubauen und zu betreiben.

Seit November 2003 betreibt BRAIN auf dem landeseigenen Glasfasernetz ein auf MPLS-Technik basierendes Gigabit-Ethernet-Netz, das „BRAIN-Verbundnetz“, mit den Diensten LAN-to-LAN-Kopplung der Einrichtungen, regionaler IP-Verkehr, Übergang zum Verwaltungsnetz und WiN-Backup. Das BRAIN-Verbundnetz löste die dezentral betreuten Vorläufernetze komplett ab. Von den derzeit 27 BRAIN-Teilnehmern nutzen 24 Einrichtungen an 53 in der Stadt verteilten Standorten die Dienste des BRAIN-Verbundnetzes, 18 Standorte sind mit 1000 Mbit/s und 35 Standorte mit 100 Mbit/s angeschlossen. Für verteilte Standorte einer Einrichtung besteht zudem die Möglichkeit, diese über dedizierte Fasern oder Bandbreiten miteinander zu vernetzen. Seit dem 2. Quartal 2007 wird im Rahmen eines Pilotprojekts der Nutzen eines zentral gemanagten Fibre-Channel-Netzwerks „BRAIN-SAN“ ermittelt, um Möglichkeiten einer verteilten Datenhaltung der Berliner Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen zu schaffen.

Zusätzlich zu den vorgenannten Diensten nutzt der DFN-Verein die BRAIN-Struktur für die Verbindungen der X-WiN-Kernnetz-knoten in Berlin und Potsdam untereinander und für Zugangsleitungen zu den Anwendern.

Mit Stand 2007 nutzt das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN vom landeseigenen Glasfasernetz 2100 km Einzelfasern und verbindet insgesamt 43 Einrichtungen (BRAIN-Teilnehmer und DFN-Anwender) aus Wissenschaft, Bildung und Kultur mit 129 Standorten.

Der Betrieb von BRAIN wird im wesentlichen durch seine Nutzer finanziert. Das Land Berlin trägt allerdings pauschal die überwiegenden Kosten für die Wartung des Glasfasernetzes, soweit es vom ITDZ bereit gestellt wird.

Zentrales Planungs- und Steuerungsorgan für BRAIN ist die von der Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung eingerichtete BRAIN-Planungsgruppe. Sie besteht aus Mitarbeitern der Rechenzentren der drei Berliner Universitäten und des ZIB. Nach außen wird BRAIN in rechtlicher und wirtschaftlicher Hinsicht treuhänderisch vom ZIB vertreten, die BRAIN-Geschäftsstelle befindet sich ebenfalls im ZIB.

Abstract: Berlin as a city state is both local authority and federal state of the Federal Republic, as well as a location of many renowned institutions of research and culture. In close cooperation of the institutions of research with the IT service centre Berlin (ITDZ, the former Landesbetrieb für Informationstechnik) – which is the appropriate facility for the authorities of Berlin – a glass fibre network of a total extension of 856 kilometres of fibre optics (144 fibres each cable optic) for the common use of research and administration has been established and advanced since 1993. In 1994, when a resolution of the Senate of Berlin laid down the use of the appropriate fibre networks by the research facilities, this was the official beginning of the Berlin Research Area Information Network (BRAIN). The first seven interfaces in this fibre network in ATM technology (Classical BRAIN-ATM) were already established by the research facilities in 1995. In 1999, first systems run in Ethernet technology (Classical BRAIN-GE). These heterogeneous networks with different interfaces have been supported locally by the network administrators of the research facilities following global agreements. Management and advancement of the overall networks were encumbered by these local administrations.

Based on the existing experience, Berlin's research facilities agreed on the building and advancement of a technically new integrated network in gigabit Ethernet technology with standardised facilities and a centrally managed network.

Since November 2003 the Berlin Research Area Information Network established a Gigabit Ethernet – called „BRAIN Integrated Network“ – based on MPLS technology, including LAN to LAN linking of the facilities, local IP traffic, interface to the administration's network and WIN back-up. This BRAIN Integrated Network has completely replaced the locally administered predecessor networks. 24 of 27 BRAIN participants use the services of the BRAIN Integrated Network on 53 locations spread all over the city. 18 locations are connected with 1000 Mbit/s and 35 locations with 100 Mbit/s. Moreover, spread locations of a single facility have the possibility to communicate by dedicated fibres or bandwidths. From the 2nd quarter 2007 within the scope of a pilot scheme, the advantage of a centrally administered fibre channel network "BRAIN-SAN" will be determined in order to accomplish possibilities of a spread data management of Berlin's universities and research facilities.

In addition to the aforementioned services the DFN association makes use of BRAIN's structure for the connection of the X-WiN-core network nodes in Berlin and Potsdam and for access pathways to the users.

As from 2007, Berlin's research network BRAIN uses 2100 kilometres of single fibres from the country's fibre glass network and connects a total of 43 facilities (BRAIN participants and DFN users) from research, education and culture with 129 locations.

The operations of BRAIN are funded basically by its users. However, the country of Berlin bears most of the costs for the maintenance of the glass fibre network, as far as it is provided by ITDZ.

Central planning and steering body for BRAIN is the BRAIN planning group, which has been arranged by the administration of the Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung. It consists of staff from the computing centres of Berlin's three universities and of ZIB.

BRAIN is represented legally and economically on a trust basis by the ZIB, where the BRAIN office is located also.

ZIB-Report 07-43. Stefan Plantikow. *Transaktionen für verteilte Wikis auf strukturierten Overlay-Netzwerken.*

Zusammenfassung: Die Arbeit präsentiert ein Transaktionsverfahren für strukturierte Overlay-Netzwerke, das an die Erfordernisse verteilter Informationssysteme mit relationalem Datenmodell angepasst ist. Insbesondere wird der Einsatz von Transaktionen für verteilte Wikis betrachtet, die moderne Funktionalitäten, wie Metadaten und zusätzliche Indexe für die Navigation, unterstützen.

Konsistenz und Dauerhaftigkeit der gespeicherten Daten erfordert die Behandlung von Knotenausfällen. Die Arbeit schlägt dafür das Zellenmodell vor: Das Overlay wird aus replizierten Zustandsmaschinen gebildet, um Verfügbarkeit zu gewährleisten. Das Transaktionsverfahren baut darauf auf und verwendet Two-Phase-Commit mit Fehlererkennung und Wiederherstellung von ausgefallenen Transaktionsmanagern. Anwendungen wird eine Auswahl an pessimistischen und hybrid-optimistischen Nebenläufigkeitskontrollverfahren geboten, die die Minimierung von Latenzeffekten und die schnelle Ausführung von Nur-Lese-Transaktionen ermöglichen. Für die Beispielanwendung Wiki wird der erforderliche Pseudocode angegeben und die verschiedenen Nebenläufigkeitskontrollverfahren hinsichtlich ihrer Nachrichtenkomplexität verglichen.

Abstract: The report presents a transaction processing scheme for structured overlay networks and uses it to develop a distributed Wiki application based on a relational data model. The Wiki supports rich metadata and additional indexes for navigation purposes. Ensuring consistency and durability requires handling of node failures. Such failures are

masked by providing high availability of nodes. This in turn is achieved by constructing the overlay from replicated state machines (cell model). Atomicity is realized using two phase commit with additional support for failure detection and restoration of the transaction manager. The developed transaction processing scheme provides the application with a mixture of pessimistic, hybrid optimistic and multiversioning concurrency control techniques to minimize the impact of replication on latency and optimize for read operations. The pseudocode of the relevant Wiki functions is presented and the different concurrency control techniques are evaluated in terms of message complexity.

ZIB-Report 07-44. Anton Schiela. *An Interior Point Method in Function Space for the Efficient Solution of State Constrained Optimal Control Problems.*

Abstract: We propose and analyse an interior point path-following method in function space for state constrained optimal control. Our emphasis is on proving convergence in function space and on constructing a practical path-following algorithm. In particular, the introduction of a pointwise damping step leads to a very efficient method, as verified by numerical experiments.

ZIB-Report 07-45. Martin Weiser. *Pointwise Nonlinear Scaling for Reaction-Diffusion-Equations.*

Abstract: Parabolic reaction-diffusion systems may develop sharp moving reaction fronts which pose a challenge even for adaptive finite element methods. We propose a method to transform the equation into an equivalent form that usually exhibits solutions which are easier to discretize, giving higher accuracy for a given number of degrees of freedom. The transformation is realized as an efficiently computable pointwise nonlinear scaling that is optimized for prototypical planar travelling wave solutions of the underlying reaction-diffusion equation. The gain in either performance or accuracy is demonstrated on different numerical examples.

ZIB-Report 07-46. Monika Kuberek. *Volltextserver der Verbände – Integrierter Zugriff auf lizenzierte Zeitschriftenartikel und freie elektronische Dokumente unter Einsatz von Suchmaschinentechnologie.*

Zusammenfassung: Die Intention ist der kooperative Aufbau einer Infrastruktur durch die Bibliotheksverbände, um den Nutzern Volltext-Angebote dauerhaft und komfortabel zur Verfügung zu stellen: Zeitschriftenartikel und elektronische Dokumente werden mittels Suchmaschinentechnologie indexiert und unter Berücksichtigung von Zugriffsrechten zugänglich gemacht. Realisiert ist dies bereits im KOBV-Volltextserver, der seit Ende 2005 im Routinebetrieb läuft.

Vorstellbar ist ein überregionales Netz von Volltextservern der Verbände, die mittels Suchmaschinentechnologie indiziert und nahtlos in das regionale und lokale Literaturangebot integriert werden. Bei den lizenzierten Materialien sind insbesondere auch die Rechte der Verlage zu wahren und entsprechende Rechtemanagement-Verfahren einzusetzen. Es gilt, transparente Verfahren zu konzipieren und umzusetzen, um für die Verlage die notwendige Vertrauensbasis zu schaffen und gleichzeitig den Einrichtungen ihren berechtigten Zugriff auf die Volltexte zu sichern.

Der vorliegende Text ist die schriftliche Fassung eines Vortrages auf dem 3. Leipziger Kongress für Information und Bibliothek „Information und Ethik“, der vom 19.-22. März 2007 im Congress Center Leipzig stattfand.

ZIB-Report 07-47. Monika Kuberek. *Open Access – Aufbau, Pflege und Betrieb lokaler Publikationsserver in der KOBV-Zentrale.*

Zusammenfassung: Zur Unterstützung der Bibliotheken bei ihren Open-Access-Aktivitäten betreibt die KOBV-Zentrale seit Anfang 2005 den Service „Opus- und Archivierungsdienste“. Die KOBV-Zentrale agiert als Application Service Provider (ASP) für sämtliche technischen Komponenten des Publikationsprozesses, indem sie die gesamte technische Infrastruktur bereitstellt und betreibt – angefangen bei den lokalen

Publikationsservern bis hin zu lokalen Repositories zur Archivierung der elektronischen Dokumente.

Der vorliegende Text ist die schriftliche Fassung eines gleichnamigen Vortrages auf der 31. ASpB-Tagung „Kooperation versus Eigenprofil?“ der Arbeitsgemeinschaft der Spezialbibliotheken, die vom 25.-28. September 2007 in der Technischen Universität Berlin stattfand.

ZIB-Report 07-48. Thomas Streuer; Hinnerk Stüben. *Simulations of QCD in the Era of Sustained Tflop/s Computing.*

Abstract: The latest machine generation installed at supercomputer centres in Germany offers a peak performance in the tens of Tflop/s range. We study performance and scaling of our quantum chromodynamics simulation programme BQCD that we obtained on two of these machines, an IBM Blue Gene/L and an SGI Altix 4700. We compare the performance of Fortran/MPI code with assembler code. The latter allows to exploit concurrency at more levels, in particular in overlapping communication and computation as well as prefetching data from main memory.

ANHANG B: VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN

B1: Vorträge und Gastaufenthalte

Artur Andrzejak

- 29.03.2007** *Software Aging: deterministic models, optimal rejuvenation schedules, and benefits of virtualisation*
Google, Zürich, Schweiz
- 22.05.2007** *Deterministic Models of Software Aging and Optimal Rejuvenation Schedules*
10th IFIP/IEEE Symposium on Integrated Management (IM 2007), München, Deutschland
- 12.06.2007** *Robust and Adaptive Modeling of Software Aging*
CoreGRID Workshop on Grid Programming Model, Grid and P2P Systems Architecture, Grid Systems, Tools and Environments, FORTH, Heraklion, Griechenland
- 29.10.2007** *Managing Performance of Aging Applications via Synchronized Replica Rejuvenation*
18th IFIP/IEEE Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2007), Silicon Valley, CA, USA
- 02.11.2007** *Measuring, Modeling and Resolving Software Aging in SOA Applications*
Hewlett-Packard Laboratories, Palo Alto, CA, USA
- 09.11.2007** *Analysis and Prediction of Time Series with StreamMiner*
Arbeitsgruppe Prof. Schweppe, Institut für Informatik, FU Berlin
- 14.11.2007** *Measuring, Modeling and Resolving Software Aging in SOA Applications*
Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spanien

Daniel Baum

- 28.08.2007** *A Point-Based Algorithm for Multiple 3D Surface Alignment of Drug-Sized Molecules*
Gastvortrag am Hamilton Institute, National University of Ireland, Maynooth, Irland

Pascal-Nicolas Becker

- 02.07.2007** *DINI-Zertifizierung – Zertifizierung von OPUS-Servern des KOBV*
5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“, ZIB, Berlin

Timo Berthold

- 19.02.2007** *Primalheuristiken in SCIP*
IP/LP-Workshop 2007, ZIB, Berlin

- 26.3.2007** *Primalheuristiken für MIPs*
Studierendenkonferenz Mathematik 2007, HU Berlin
- 23.05.2007** *The MIP-Solving-Framework SCIP*
TU Berlin
- 30.07.2007** *SCIP – Solving Constraint Integer Programs*
Poster- und Softwarepräsentation MIP2007, Centre de Recherches Mathématiques, Montréal, Kanada
- 06.09.2007** *Primal Heuristics for MIPs*
Operations Research 2007, Universität des Saarlandes, Saarbrücken
- 11.10.2007** *Primal Heuristics in SCIP*
SCIP Workshop 2007, ZIB, Berlin

Andreas Bley

- 01.03.2007** *Open-pit mine scheduling with a single stockpile*
Workshop on Rock Mechanics and Logistics in Mining, CMM, Santiago de Chile, Chile
- 10.07.2007** *Routing and capacity optimization for IP networks*
European Conference on Operations Research (EURO 2007), Prag, Tschechische Republik
- 10.07.2007** *Open-pit mine scheduling with a single stockpile*
European Conference on Operations Research (EURO 2007), Prag, Tschechische Republik
- 06.09.2007** *Routing and capacity optimization for IP networks*
Operations Research 2007 (OR 2007), Universität Saarbrücken
- 21.09.2007** *Branch-and-bound techniques for a mine production scheduling problem*
13. Czech-French-German Conference on Optimization (CFG 2007), Heidelberg
- 01.11.-22.12.2007**
Gastaufenthalt an der Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- 14.11.2007** *Models and algorithms for traffic engineering in IP networks*
Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- 22.11.2007** *Branch-and-bound solution techniques for MINLPs arising in mine production planning*
7. Chilean Conference on Operations Research (OPTIMA 2007), Puerto Montt, Chile

Ralf Borndörfer

- 10.01.2007** *S-Bahn-Umtriebsoptimierung*
Workshop über Umlaufplanung, S-Bahn München
- 06.02.2007** *Das Projekt Trassenbörse*
Bundesnetzagentur, Bonn
- 09.02.2007** *Umlauf- und Dienstplanung*
Studententag der Abteilung Optimierung, ZIB, Berlin
- 15.02.2007** *Umlaufplanung*
DB Systems GmbH, Frankfurt
- 01.03.2007** *Design and Operation of Transportation Networks*
Workshop on Rock Mechanics and Logistics in Mining, CMM, Santiago de Chile, Chile
- 20.03.2007** *Strategic Planning in Public Transport*
ÖPNV-Kolloquium, WIP, TU Berlin

- 22.05.2007** *Einsatz IS-OPT bei städtischen und regionalen Verkehrsbetrieben*
3. Psyrus-Anwenderwendertagung, DB Stadtverkehr GmbH, Kassel
- 04.07.2007** *Dienstplanoptimierung mit Spaltenerzeugung*
Workshop über parallele Optimierung, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 13.07.2007** *Traffic Optimization*
11. MATHEON-Mitgliederversammlung, TU Berlin
- 19.07.2007** *Mathematische Optimierung im Verkehr*
Optimierungsworkshop, SBB, Bern, Schweiz
- 23.07.2007** *Optimizing Public Transport*
Workshop zur Verkehrsoptimierung, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 03.08.2007** *Traffic and Mathematics*
Workshop zur Verkehrsoptimierung, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 05.09.2007** *When Periodic Timetables are Suboptimal*
Operations Research 2007 (OR 2007), Universität des Saarlandes, Saarbrücken
- 26.09.2007** *Mathematische Modelle für Trassenallokationsprobleme*
Kolloquium Automatische Generierung von Fahrplänen, TU Dresden
- 09.10.2007** *Dienstplanoptimierung*
Optimierungsworkshop, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 12.10.2007** *Service Design in Public Transport*
WIP-MATHEON-Workshop Mathematics meets Economics, WIP, TU Berlin
- 24.10.2007** *Optimierung des Einsatzes von Flughafenbodenpersonal*
Workshop über Personaleinsatzplanung, GlobeGround Berlin GmbH, Flughafen Berlin-Schönefeld
- 21.11.2007** *Perspektiven Dienstplanoptimierung*
Innovationsworkshop Dienstplanoptimierung, DB Stadtverkehr, Fulda

Manfred Brandt

- 11.07.2007** *Waiting times for M/M systems under generalized processor sharing*
14th Applied Probability Society of INFORMS Conference, Eindhoven, Niederlande

Sven Burger

- 23.04.2007** *Finite Element Simulations of Photonic Crystal Structures*
Photonic Crystals – past, present, future, Bad Honnef
- 19.06.2007** *3D Simulations of Electromagnetic Fields in Nanostructures using the Time-Harmonic Finite-Element Method*
SPIE Modeling Aspects in Optical Metrology, München
- 19.09.2007** *EMF Simulations of Isolated and Periodic 3D Photomask Patterns*
SPIE Photomask Technology, Monterey, USA
- 08.11.2007** *Scientific Computing for the Design of Nano-optical Devices*
Meet Nano Berlin 2007

Carlos Henrique Cardonha

- 19.04.2007** *Quantum Computing*
ZIB, Berlin
- 31.08.2007** *The Tram Dispatching Problem*
PSI Transcom GmbH, Berlin

02.10.2007 *The Depot Management Problem*
PSI Transcom GmbH, Berlin

Wolfgang Dalitz

27.03.2007 *Projektmanagement für die IMU*
Jahrestagung der DMV 2007, Berlin

Vincent Dercksen

24.9.2007 *Reconstruction of 3D models of biological objects from serial sections. Sprecher:*
Hans-Christian Hege
Plant Bioinformatics – A BIC-GH Symposium, Halle/Saale

Peter Deuflhard

29.01.2007 *Mathematical modelling and simulation in facial surgery*
eScience Meeting 2007, SINTEF ICT, Oslo, Norwegen

08.02.2007 *Effiziente Modellierung, Simulation und Visualisierung am ZIB*
Adolf-Martens-Kolloquium, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM),
Berlin

28.03.2007 *Bessel'scher Irrgarten*
Gemeinsame Jahrestagung der DMV und der GMD, HU Berlin

26.04.2007 *Das ZIB – Struktur, Mission, Synergie*
Berliner Wirtschaftsgespräche e. V., ZIB

26.04.2007 *Das Lächeln der Mathematiker – Mathematik im Dienste der Medizin*
Berliner Wirtschaftsgespräche e. V., ZIB

24.05.2007 *Mathematik in der Mund-, Kiefer-, und Gesichtschirurgie*
Mathematisches Kolloquium, Fakultät für Mathematik und Informatik, Friedrich-Schiller-
Universität, Jena

08.06.2007 *Was ist ein schönes Gesicht?*
Silberne Promotion 1982-2007, FU Berlin

05.07.2007 *Panel „Die universale Achterbahn: Im Netz der illusionären Wirklichkeit“*
Veranstaltungsreihe „Arts meets Science“ anlässlich des 80. Geburtstages von Herbert
Franke, Zentrum für Kunst und Medientechnologie, Karlsruhe

11.09.2007 *Mathematik in der Gesichtschirurgie-Planung*
ENUMATH 2007, Institute for Mathematics and Scientific Computing, Universität Graz,
Österreich

13.09.2007 *The Zuse Institute Berlin (ZIB). High Math for High Tech*
Lufthansa Systems Airline Forum 2007, Dresden

21.11.2007 *Mathematik im Dienst der modernen Medizin. Von der Krebstherapie zur Mund-
Kiefer-Gesichtschirurgie*
Johann Radon Lecture, Österreichische Akademie der Wissenschaften, Wien, Österreich

04.12.2007 *Mathematical Modelling and Simulation in Cranio-Maxillofacial Surgery*
Simula (Norwegen) CBC Seminar, Berlin

Andreas Eisenblätter

27.02.2007 *Integrated Access Point Placement and Channel Assignment for Wireless LANs
in an Indoor Office Environment*

COST 2100, Lissabon, Portugal

21.06.2007 *Optimization of 2G/3G Radio Networks*
Universität Karlsruhe

18.07.2007 *Optimierung von GSM- und UMTS-Mobilfunknetzen*
ICIAM, Zürich, Schweiz

25.09.2007 *Automatic Frequency Planning in GSM Networks: How to replenish the spectrum*
FAP Workshop, Trebic, Tschechien

Hans-Florian Geerdes

26.04.2007 *Project B4: Planning the UMTS Radio Interface*
MATHEON B-Day, TU Berlin

17.05.2007 *Introduction to UMTS Radio Network Optimization*
KTS Seminar, Linköping University, Schweden

21.05.2007 *Model-based Planning and Optimization of UMTS FDD Radio Networks*
Seminar, Ericsson Research, Kista, Schweden

19.10.2007 *The Complexity of UMTS Radio network Capacity Optimization*
MAGSI-Seminar, TU Berlin

24.10.2007 *Reconciling Theory and Practice: A Revised Pole Equation for W-CDMA Cell Powers*
ACM MSWiM'07, Chania, Griechenland

29.10.2007 *Schöner telefonieren: Planung von Mobilfunknetzen mit Mathematik*
Matheredaktion, ZIB, Berlin

13.11.2007 *Planung von UMTS-Funknetzen: Modellierung, Optimierung und Komplexität*
SWADO'07, Fulda

12.12.2007 *Performance Evaluation and Optimization for Wireless Networks*
ZIB-HHI-Workshop, ZIB, Berlin

Martin Grötschel

12.02.2007 *Linear programming: state of the art and open questions*
BMS Days, Urania, Berlin

12.02.2007 *Representations of Polyhedra*
BMS Days, Urania, Berlin

26.02.2007 *MATHEON: A brief survey of its activities*
Workshop on Rock Mechanics and Logistics in Mining, CMM, Santiago de Chile, Chile

23.03.2007 *Mathematics and Transportation*
OECD Global Science Forum, Universität Heidelberg

27.03.2007 *Diskrete Mathematik und ihre Anwendungen: auf dem Weg zu authentischem Mathematikunterricht (gemeinsam mit Brigitte Lutz-Westphal)*
DMV-GDM-Jahrestagung 2007, HU Berlin

28.03.2007 *Making Better Use of Railway Tracks*
2nd International Seminar on Railway Operations Modelling and Analysis – Rail Hannover 2007, Universität Hannover

27.04.2007 *Königsberger Brücken und die moderne Optimierung*
Eröffnungsvortrag auf dem Symposium zum 300. Geburtstag von Leonhard Euler, HU Berlin

- 07.05.2007** *Linear programming and some new insights from semi-algebraic geometry*
Optimization Days 2007, GERAD – HEC Montreal, Montréal, Kanada
- 04.06.2007** *The rise of discrete mathematics in the last 50 years*
Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam
- 05.07.2007** *Frequency Assignment*
Sommerschule an der Jacobs-Universität, Bremen
- 24.07.2007** *Half a Century of Discrete Mathematics: a Progress Report*
23rd IFIP TC 7 Conference on System Modelling and Optimization, 2007, Krakau, Polen
- 26.07.2007** *Nemhauser*
Symposium in Honor of George Nemhauser's 70th Birthday, Atlanta, USA
- 18.10.2007** *Lineare und ganzzahlige Optimierung: Theorie, Praxis und Anwendungen*
Eröffnung des Servicezentrums Mathematik und Anwendungen (SZMA), Ruhr-Universität Bochum
- 19.10.2007** *Mathematik im Alltag – nicht ganz alltägliche Mathematik*
Universität Kaiserslautern
- 05.11.2007** *Zum Einsatz mathematischer Methoden in der Telekommunikation*
RWTH Aachen
- 07.11.2007** *Mathematik: Produktionsfaktor in der Telekommunikation*
Telekom, T-Gallery, Bonn
- 13.11.2007** *Open Access: Träume und Wirklichkeit*
Fachtagung zum 15-jährigen Bestehen der Hochschulbibliothek der FH Brandenburg
- 15.11.2007** *Logistics, traffic, telecommunication – application areas for optimization with high potentials*
Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, Universität Warschau, Polen
- 20.11.2007** *Gibt es in der Linearen Optimierung noch etwas zu erforschen?*
Augsburger Mathematisches Kolloquium, Universität Augsburg
- 26.11.2007** *Linear and Integer Programming: State of the Art*
Hyderabad University Colloquium, Hyderabad, Indien
- 27.11.2007** *Organizing an ICM: Pleasure or Nightmare?*
Hyderabad University, Hyderabad, Indien
- 28.11.2007** *Linear and Integer Programming: State of the Art*
Indian Institute of Science, Bangalore, Indien
- 30.11.2007** *The Travelling Salesman Problem: State and Art*
Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai, Indien
- 10.12.2007** *Optimierung von diskreten Prozessen*
Workshop „Optimierung von Systemen“, Innovationszentrum Energie der TU Berlin
- 19.12.2007** *Optimierung und Diskrete Mathematik: Theoretische und algorithmische Fortschritte*
Fachbereich Mathematik, Universität Dresden

Hans-Christian Hege

- 25.01.2007** *Extraktion und Visualisierung von strukturellen Strömungsmerkmalen*
Institut für Technische Verbrennung, RWTH Aachen
- 31.01.2007** *Anatomy Reconstruction, Atlas Construction and Visualization in Biomedicine*
Polish-German Workshop on Modeling in Life Sciences, Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, Warschau, Polen

- 07.03.2007** *What's next in Topological Visualization?*
Moderation einer Panel Session, International Workshop on Topology-Based Methods in Visualization 2007, Grimma
- 15.03.2007** *Recent Developments in Anatomy Reconstruction from 3D Image Data*
Anatomisches Institut, Universität Zürich
- 23.03.2007** *Extraction and Visualization of Structural Flow Features*
Seminar „Experimental Fluid Mechanics, Computer Vision & Pattern Recognition“, Schloß Dagstuhl
- 12.04.2007** *Visualization in Science*
Institut für Biomathematik und Biometrie, GSF – Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, Neuherberg
- 12.04.2007** *Creation, Visualization and Utilization of Anatomical Standard Atlases*
Institut für Biomathematik und Biometrie, GSF – Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit, Neuherberg
- 17.04.2007** *Extraction and Visualization of Structural Flow Features*
Fujitsu Research Laboratories, Kawasaki, Japan
- 21.04.2007** *Reconstruction, Integration and Visualization of Neuronal Structures*
Workshop „Inverse Problems“ Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa, Japan
- 26.04.2007** *Visuelle Datenanalyse*
Berliner Wirtschaftstage, Vorführung im Studio da Vinci, ZIB, Berlin
- 19.06.2007** *Why didn't we invent Google Earth? Will we miss the next chance, too?*
Seminar „Scientific Visualization“, Schloß Dagstuhl
- 26.06.2007** *Visuelle Analyse von Daten*
Ständige Kommission des HLRN, Vortrag mit Life-Demo im Studio da Vinci, ZIB, Berlin
- 24.09.2007** *Reconstruction of 3D Models of Biological Objects from Serial Sections*
Vortrag mit Life-Demo, Plant Bioinformatics – A BIC-GH Symposium, Universität Halle
- 24.11.2007** *Navigation in Datenräumen*
Workshop „Navigation in Visuellen Räumen“, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin

Stefan Heinz

- 12.4.2007** *Counting in the Field of Verification*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 19.09.2007** *Computing the Covering Measure Value (Feasibility Study)*
OneSpin Solutions GmbH, München

Karin Herm

- 02.07.2007** *Suche in elektronischen Zeitschriften und Publikationen leicht gemacht – Die Technik hinter dem KOVB-Volltextserver*
5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“, ZIB, Berlin
- 14.11.2007** *OPAC und mehr – Neue Suchräume für Bibliotheken, Ein neuer ASP-Dienst der KOBV-Zentrale, Die Technik*
9. Sun Summit Bibliotheken „Verfügbarkeit, Integrität, Authentizität – Reform, Umbruch und Modernisierung der digitalen Objekte“, Deutsche Nationalbibliothek, Frankfurt am Main

- 06.12.2007** *Bibliothekssuchmaschine statt Bibliothekskatalog – Die neue Lucene-Anwendung der KOBV-Zentrale aus technischer Sicht.*
KOBV-Workshop für Bibliotheken, ZIB, Berlin

Benjamin Hiller

- 29.05.–01.06.2007** *Forschungsaufenthalt bei Tjark Vredeveld*
Universität Maastricht, Niederlande
- 30.05.2007** *Probabilistic comparison of online bin coloring algorithms using stochastic dominance*
Universität Maastricht, Niederlande
- 02.08.2007** *Probabilistic comparison of online bin coloring algorithms using stochastic dominance*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 21.08.2007** *Probabilistic comparison of online bin coloring algorithms using stochastic dominance*
PROFIT, TU Berlin
- 28.10.2007** *Analyse von Online-Bin-Coloring-Algorithmen mittels stochastischer Dominanz*
Future Research in Combinatorial Optimization (FRICO 2007), Universität Bayreuth

Mikael Höggqvist

- 26.03.2007** *The AstroGrid-D Information Service*
D-Grid Metadata Workshop, SUB, Göttingen
- 03.05.2007** *Stellaris: An RDF-based Information Service for AstroGrid-D*
German e-Science Conference, Baden-Baden
- 08.05.2007** *Stellaris: An RDF-based Information Service for AstroGrid-D*
The Astronomical Virtual Observatory - Building Operational Services on Pervasive Grids: Standards in Use, OGF20 Workshop, Manchester, Vereinigtes Königreich
- 11.09.2007** *Stellaris: Federated Metadata Management*
D-Grid All Hands Meeting, Göttingen

Ingrid Hotz

- 10.01.2007** *Anisotropic Noise Samples for Tensor Visualization*
Dagstuhl Seminar on Visualization and Processing of Tensor Fields, Dagstuhl
- 04.09.2007** *Dense Glyph Sampling for Visualization*
Dagstuhl Seminar on Scientific Visualization, Dagstuhl
- 01.11.2007** *Moment Invariants for the Analysis of 2D Flow Fields*
IEEE Visualization Conference 2007, Sacramento, USA

Ralf Kaehler

- 04.09.2007** *Simultaneous GPU-Assisted Raycasting of Unstructured Point Sets and Volumetric Grid Data*
IEEE/EG International Symposium on Volume Graphics 2007, Prag, Tschechien

Dagmar Kainmüller

- 23.10.2007** *Vollautomatische Segmentierung der Leber aus kontrastverstärkten CT-Daten*
8. Treffen des Arbeitskreises MedVis, Karlsruhe

- 29.10.2007** *Automatic Segmentation of the Liver from Contrast Enhanced CT Data*
10th International Conference on Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention, Workshop „3D Segmentation in the Clinic: a grand challenge“, Brisbane, Australien

Benjamin Kettner

- 28.04.2007** *Simulation of resonance modes in pillar-type cavities using finite element methods*
OWTNM 2007, TU Kopenhagen, Dänemark
- 10.07.2007** *Simulation of resonance modes in pillar-type cavities using finite element methods*
3rd Workshop on Numerical Methods for Optical Nano Structures, ETH Zürich, Schweiz

Corinna Klapproth

- 30.10.2007** *Mathematik hilft Knien auf die Sprünge*
MATHEredaktiON, ZIB, Berlin

Thorsten Koch

- 07.05.2007** *Software Engineering for Mathematical Software?*
Oberwolfach Workshop „Algorithm Engineering“, Oberwolfach
- 29.05.2007** *Current Development of MIP tools at ZIB: SCIP, Zimpl, SoPlex, and friends*
CORE Mathematical Programming Seminar, Brüssel, Belgien
- 05.07.2007** *Planning Cellular Networks*
Summer School „Progress in Mathematics for Communication Systems“, Jacobs-Universität Bremen
- 06.07.2007** *Integer Optimization: Mathematics, Algorithms, and Applications*
Summer School „Progress in Mathematics for Communication Systems“, Jacobs-Universität Bremen
- 10.07.2007** *The SCIP Framework*
MATHEON Sino-German Workshop on Nonlinear Integer Programming and Structural Optimization, TU Berlin
- 3.12.2007** *Optimizing the Landside Operation of a Container Terminal*
CAS-ZIB-Siemens Workshop, Siemens Corporate Technology, München
- 4.12.2007** *Optimizing the Landside Operation of a Container Terminal*
AG7-Seminar, TU Darmstadt

Arie M. C. A. Koster

- 05.02.2007** *Single-layer cuts for multi-layer network design problems*
AIRO Winter Conference 2007, Cortina d'Ampezzo, Italien

Susanna Kube

- 16.07.2007** *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems*
6th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Zürich

Monika Kuberek

- 24.01.2007** *Was ist und was bezweckt der KOBV? – Zielsetzungen, Selbstverständnis*
Kolloquium der KOBV-Zentrale für Berliner BibliotheksreferendarInnen „Der KOBV – der regionale Bibliotheksverbund für Berlin und Brandenburg“, ZIB, Berlin

- 20.03.2007** *Volltextserver der Verbände – Integrierter Zugriff auf lizenzierte Zeitschriftenartikel und freie elektronische Dokumente unter Einsatz von Suchmaschinentechnologie*
3. Leipziger Kongress für Information und Bibliothek „Information und Ethik“, Congress Center Leipzig
- 02.07.2007** *KOBV-Services – Was bleibt? Was ändert sich?*
5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“, ZIB, Berlin
- 26.09.2007** *Open Access – Aufbau, Pflege und Betrieb lokaler Dokumentenserver in der KOBV-Zentrale*
ASpB-Tagung 2007 „Kooperation versus Eigenprofil?“, Session 11 „Open Access – Technische und organisatorische Lösungen“, Universitätsbibliothek der TU Berlin
- 26.10.2007** *Digitalisierung und mehr*
Brandenburgische Runde zur Digitalisierung von Kulturgut, 2. Sitzungsrunde, Stadt- und Landesbibliothek Potsdam

Anja Kuß

- 30.01.2007** *Pipeline for the Creation of Surface-based Averaged Brain Atlases*
15th International Conference in Central Europe on Computer Graphics and Computer Vision (WSCG'2007), Plzen, Tschechien

Hans Lamecker

- 23.02.2007** *A method for the three-dimensional statistical shape analysis of the bony orbit*
4th Int. Conf. on Computer Aided Surgery around the Head, Innsbruck, Österreich
- 20.07.2007** *Variational Surface Matching and Applications in Medicine*
6th Int. Congr. on Industrial and Applied Mathematics, Zürich, Schweiz

Stefan Lohrum

- 24.01.2007** *KOBV-Dienstleistungen*
Kolloquium der KOBV-Zentrale für Berliner BibliotheksreferendarInnen „Der KOBV – der regionale Bibliotheksverbund für Berlin und Brandenburg“, ZIB, Berlin
- 05.09.2007** *Less is More: Results from a MetaLib Users Survey*
2nd IGELU Conference, 03.-06.09.2007, Brno, Tschechien

Joachim Lügger

- 27.03.2007** *Kollaborationsformen und Social Software für die Mathematik im Web 2.0*
Gemeinsame Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung und der Gesellschaft für Didaktik der Mathematik, HU Berlin

Monika Moser

- 27.08.2007** *Atomic Commitment in Transactional DHTs*
First CoreGRID Symposium, Rennes, Frankreich

Marika Neumann

- 26.04.2007** *Projekt B15: Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr*
MATHEON B-Day, TU Berlin

05.09.2007 *A Branch-and-Cut-and-Price Algorithm for Line Planing in Public Transport*
Operations Research 2007 (OR 2007), Universität des Saarlandes, Saarbrücken

28.09.2007 *Ein Branch-and-cut-and-price-Algorithmus für die Linienplanung*
Future Research in Combinatorial Optimization (FRICO 2007), Universität Bayreuth

Winfried Neun

01.02.2007 *Parallel sparsening and simplification of systems of equations (with T. Wolf)*
Workshop „Interactive Parallel Computation in Support of Research in Algebra, Geometry and Number Theory“, MSRI, Berkeley, USA

21.07.2007 *About a Computer Algebra Based Online Mathtest (with T. Wolf)*
Konferenz ACA 2007, Oakland University, Rochester, MI, USA

Sebastian Orlowski

23.01.2007 *Mixed Integer Programming for Multi-Layer Transport Networks*
Siemens, München

24.04.2007 *SNDlib 1.0–Survivable Network Design Library*
International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien

26.04.2007 *Project B3: Integrated Planning of Multi-Layer Networks*
MATHEON B-Day, TU Berlin

24.04.2007 *Two-Layer network design using branch-and-cut featuring MIP-based Heuristics*
International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien

04.06.2007 *Single-Layer Cuts for Multi-Layer Networks*
Cost 293 meeting, Castiglioncello, Italien

05.07.2007 *Single-Layer Cuts for Multi-Layer Network Design Problems*
ZIB-Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

12.12.2007 *Multi-Layer Transport Network Optimization*
ZIB-HHI-Workshop, Berlin

Kathrin Peter

31.08.2007 *Erasure-tolerant Codes for Rule-based Grid Storage Systems*
1st Baltic Conference on Advanced Topics of Telecommunications, Riga, Lettland

Christoph Petz

5.9.2007 *Visualization with Amira*
Integration Workshop, Strathclyde University, Glasgow, Schottland

Marc Pfetsch

09.01.2007 *Exact and Approximate Sparse Solutions of Linear Equations*
11th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

26.04.2007 *Symmetrien in der Ganzzahligen Programmierung*
MATHEON B-Day, TU Berlin

25.06.2007 *Orbitopal Fixing*
12th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO 2007), Ithaca, USA

- 14.12.2007** *Maximal unzulässige Teilsysteme und „dünne“ Lösungen von linearen Gleichungssystemen*
TU Braunschweig

Stefan Plantikow

- 15.06.2007** *Distributed Wikis on Structured Overlays*
CoreGrid Workshop on Grid Programming Models, Grid and P2P System Architecture, Grid Systems, and Environments, Heraklion, Griechenland
- 28.10.2007** *Transactions for Distributed Wikis on Structured Overlays*
18th IFIP/IEEE International Workshop on Distributed Systems: Operations and Management (DSOM 2007), San Jose, USA

Jan Pomplun

- 23.01.2007** *FEM investigation of leaky modes in hollow core photonic crystal fibers*
SPIE Photonics West 2007, San Jose, USA
- 19.06.2007** *Finite element analysis of EUV lithography*
SPIE Optical Metrology 2007, München

Steffen Prohaska

- 27.02.2007** *Analysis of 3D data in Geo-Sciences: Visualization and Feature Extraction*
Workshop on Rock Mechanics and Logistics in Mining, Santiago de Chile, Chile
- 25.04.2007** *Visuelle Datenanalyse mit Amira*
Eingeladener Vortrag: HLRN-Workshop „Graphisches Postprocessing“, Hannover

Christian Raack

- 08.03.2007** *Comparison of Grooming Heuristics*
BMBF-Verbundvorhaben Efficient Integrated Backbone (EIBONE), Arbeitskreis Netze, TU München
- 24.04.2007** *On capacitated network design using general flow-cutset inequalities*
International Network Optimization Conference (INOC 2007), Spa, Belgien
- 29.09.2007** *Schnittbasierte Ungleichungen für Netzwerkdimensionierungsprobleme*
Future Research in Combinatorial Optimization (FRICO 2007), Universität Bayreuth
- 04.10.2007** *Grooming and RWA Algorithms*
BMBF-Verbundvorhaben Efficient Integrated Backbone (EIBONE), Arbeitskreis Netze, TU Stuttgart
- 13.11.2007** *Cut-based Inequalities for Capacitated Network Design Problems*
DIMAP Seminar, Centre for Discrete Mathematics and its Applications, University of Warwick, Vereinigtes Königreich

Isabel Reinecke

- 15.11.2007** *A Complex Mathematical Model of the Human Menstrual Cycle*
Bayer Schering Pharma, Berlin

Alexander Reinefeld

- 26.04.2007** *Mehr Erfolg durch mehr Flops: Berlin vernetzt mit der Welt*
Berliner Wirtschaftsgespräche

- 21.09.2007** *Effiziente Nutzung von Supercomputern und Hardware-Acceleratoren*
Advanced Micro Devices, Inc., Dresden
- 06.12.2007** *Scientific Computing and Computer Science at Zuse Institute Berlin*
KTH Computational Science and Engineering Center, Stockholm, Schweden

Thomas Röblitz

- 29.03.2007** *Reserving Multiple Resources in Advance*
Google Zürich, Schweiz
- 09.05.2007** *AstroGrid-D*
OGF 20, Workshop The Astronomical Virtual Observatory - Building Operational Services on Pervasive Grids: Standards in Use, Manchester, Vereinigtes Königreich
- 11.05.2007** *Co-Reservation of Resources in the Grid*
CoreGRID WP6 Workshop, Manchester, Vereinigtes Königreich
- 05.09.2007** *Managing Quality of Service Guarantees for Distributed Applications by Reserving Multiple Resources in Advance*
CoreGRID Summer School, Budapest, Ungarn

Robert Roggenbuck

- 27.03.2007** *Mathematische Verbundprojekte im Web*
Jahrestagung der DMV 2007, Berlin
- 12.03.2007** *Das Internetportal zum Förderbereich NGEE: Warum Projektpräsentationen im Internet?*
BMBF-Statusseminar des Förderbereichs „Netzwerke Grundlagenforschung erneuerbare Energien und rationelle Energieanwendung“, Berlin
- 30.05.2007** *MathematikerInnen machen sich nützlich: Projektinformationen und eine Expertendatenbank der angewandten Mathematik*
13. Jahrestagung der IuK-Initiative Wissenschaft, Köln

Beate Rusch

- 02.07.2007** *Von Zugvögeln lernen: Zur Datenmigration in eine zentrale Verbunddatenbank (zusammen mit Monika Lill)*
5. KOBV-Forum, ZIB, Berlin
- 02.07.2007** *Weniger ist mehr: Konsequenzen aus der Benutzerumfrage für das KOBV-Portal*
5. KOBV-Forum, ZIB, Berlin

Carlos Saro

- 06.06.2007** *Webservice-basierter Zugriff auf kontrollierte Vokabulare: Entwurf einer Schnittstellendefinition*
Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Frankfurt/Main
- 17.09.2007** *Workshop: Der Zugang zu Normvokabularien durch WebServices (gemeinsam mit Regine Stein)*
Österreichischer Dokumentartag, Graz, Österreich
- 09.10.2007** *Kurzpräsentation GOS mit dem Schwerpunkt Schnittstellen*
Herbsttagung zur Museumsdokumentation, Berlin
- 10.10.2007** *Beispiel einer webservice-gestützten systematischen Suche in den Beständen des Stadtgeschichtlichen Museums Leipzig*
Herbsttagung zur Museumsdokumentation, Berlin

Achim Schädle

- 18.04.2007** *Adaptive, fast and oblivious convolution quadrature*
Forschungsseminar Numerische Analysis, HU Berlin
- 21.06.2007** *Adaptive, fast and oblivious convolution quadrature*
Joint International Meeting UMI-DMV, Perugia, Italien
- 26.07.2007** *Transparent boundary conditions - the pole condition approach*
Waves 2007 Conference, Reading, Vereinigtes Königreich

Anton Schiela

- 29.03.2007** *Theoretic and Algorithmic Aspects of Newton Methods in Function Space*
DMV Tagung 2007, Berlin
- 10.05.2007** *Barrier Methods for Optimal Control Problems with State Constraints*
Seminar des Fachgebiets Optimierung bei partiellen Differentialgleichungen, TU Berlin
- 29.06.2007** *Homotopy Methods for Optimal Control Problems with State Constraints*
SIAM Conference on Control and its Applications, San Francisco, USA
- 16.07.2007** *Path-Following Methods in Function Space for State Constrained Optimal Control*
ICIAM 2007, Zürich, Schweiz
- 19.11.2007** *The Sum-Rule and Custom made spaces for Optimality Conditions*
Seminar des Fachgebiets Optimierung bei partiellen Differentialgleichungen, TU Berlin
- 17.12.2007** *Interior Point Methods for State Constrained Optimal Control*
NCP'07 Rouen, Frankreich

Florian Schintke

- 27.03.2007** *iRODS*
D-Grid Metadatenworkshop, Göttingen
- 11.09.2007** *Flexibles Datenmanagementsystem iRODS*
Erstes D-Grid All Hands Meeting – Workshop Daten, Göttingen

Thomas Schlechte

- 29.03.2007** *Solving Railway Slot Allocation Problems to Optimality*
ISROR, Universität Hannover
- 07.09.2007** *Solving Railway Track Allocation Problems*
Operations Research 2007 (OR 2007), Universität des Saarlandes, Saarbrücken
- 16.11.2007** *Models for Railway Track Allocation*
ATMOS 2007, Sevilla, Spanien

Frank Schmidt

- 28.02.2007** *Adaptive finite element methods for optical device design*
386. Heraeus-Seminar, Bad Honnef
- 06.04.2007** *Computational Nano-Optics at Zuse Institute, Matheon, JCMwave*
Seminar at Cadence Design Systems, Inc., Berkeley, USA
- 11.04.2007** *Computational Nano-Optics*
Seminar at University of California, Berkeley, USA
- 27.04.2007** *An adaptive finite element method for the optimization of photonic crystal fibers*
OWTNM 2007, TU Kopenhagen, Dänemark

19.07.2007 *Lithography mask characterization from measured scatterometry data*
ICIAM 2007, ETH Zürich, Schweiz

20.07.2007 *Construction of Transparent Boundary Conditions by the Pole Condition Method*
ICIAM 2007, ETH Zürich, Schweiz

Thorsten Schütt

29.08.2007 *A Structured Overlay for Multi-Dimensional Range Queries*
Euro-Par 2007, Rennes, Frankreich

Heiko Seim

08.11.2007 *Segmentation of Medical Image Data using Statistical Shape Models and the Software Amira*
Technisches Projekttreffen des EU FP6 Projektes „DeSSOS“, Charité, Campus Charité Mitte, Berlin

Wolfram Sperber

27.03.2007 *Workflow im Zentralblatt MATH*
Jahrestagung der DMV 2007, Berlin

Regine Stein

06.06.2007 *Museumsdaten in Portalen - museumdat, Vorschlag eines Harvestingformates*
Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Frankfurt/Main

22.08.2007 *Data ante Porta(l)s, Opening doors with Standard based Keys*
Jahrestagung der CIDOC, Wien, Österreich

19.09.2007 *Museumsdaten in Portalen – die Vernetzungsstandards MuseumDAT und MuseumVOC*
Österreichischer Dokumentartag, Graz, Österreich

10.10.2007 *Museumdat 1.0 – von der Planung zum Einsatz*
Herbsttagung zur Museumsdokumentation, Berlin

10.11.2007 *CDWA-Lite and MuseumDAT*
Museum Computer Network Conference 2007, Chicago, USA

Thomas Steinke

16.02.2007 *OpenFPGA: Mission and Activities*
Center of Excellence HyperTransport Symposium, Mannheim

28.03.2007 *OpenFPGA: Mission and Activities*
Manchester Reconfigurable Computing Conference MRC2007, Manchester, Vereinigtes Königreich

12.04.2007 *About Workflow Environments for Chemistry*
COST D37 AIMD4Grid Working Group Meeting, Zürich, Schweiz

18.04.2007 *On the Usability of Solutions from the caBIG Project in MediGRID*
eHealth Conference 2007, Berlin

22.06.2007 *Workflow Systems for Distributed Computing: an User's Perspective*
Distributed Computing in Computational Science (DCCS 2007), Wien, Österreich

- 27.06.2007** *Programmability of FPGAs for Application Developers*
BoF-Session ISC 2007, Dresden
- 19.07.2007** *The Generic API Proposal*
Reconfigurable Systems Summer Institute 2007, NCSA, Urbana-Champaign, USA
- 21.09.2007** *About Parallel Programming for Multi-Core Systems: OpenMP*
AMD Dresden Design Center Meeting, Dresden
- 30.09.2007** *Chemical Workflows and Requirements for Visualization*
COST D37 ELAMS Working Group Meeting, Budapest, Ungarn
- 01.10.2007** *Activities of the COST D37 GridChem - Computational Chemistry Workflow Group*
EGEE'07 Conference, Budapest, Ungarn
- 13.12.2007** *Reflections on Reconfigurable Computing*
EU Reconfigurable Computing Workshop, Brüssel, Belgien
- 17.12.2007** *Recent Technology Trends in HPC*
Bayer-Schering-Pharma Meeting, Berlin

Jan Stender

- 23.09.2007** *XtreemFS: a case for object-based storage in Grid data management*
VLDB Workshop on Data Management in Grids, Wien, Österreich
- 03.10.2007** *XtreemFS*
HPC File Systems: From Cluster to Grid, Rennes, Frankreich

Rüdiger Stephan

- 08.09.-15.09.2007**
Gastaufenthalt an der Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA
- 30.07.-02.08.2007** *Cardinality constrained path and cycle polytopes*
Posterpräsentation, Centre de Recherches Mathématiques, Montréal, Kanada

Hinnerk Stüben

- 18.05.07** *Status of the LatFor Datagrid*
10th ILDG Workshop, weltweite Video-Konferenz
- 04.09.07** *Simulations of QCD in the era of sustained TFlop/s computing*
Parallel Computing (ParCo) 2007, Aachen und Jülich
- 29.09.07** *Transnational Access to ZIB*
HadronPhysics2 Opening Meeting, Frascati, Italien
- 04.12.07** *Simulation of $N_f = 2 + 1$ lattice QCD at realistic quark masses*
Third Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop, Garching
- 11.12.07** *Sustaining TFlop/s in Simulations of Lattice QCD*
Poster, Evaluation of the proposal SFB/TR 55, Regensburg

Andreas Tuchscherer

- 01.03.2007** *Online Optimization in Logistics*
Workshop on Rock Mechanics and Logistics in Mining, CMM, Santiago de Chile, Chile
- 26.04.2007** *Combinatorial Aspects of Logistics*
Matheon B-Day 2007, TU Berlin

06.09.2007 *Real-Time Destination-Call Elevator Group Control on Embedded Microcontrollers*

Operations Research 2007 (OR 2007), Universität des Saarlandes, Saarbrücken

28.09.2007 *Aufzugsgruppensteuerung in Echtzeit: Zielrufsysteme und herkömmliche Systeme*

Future Research in Combinatorial Optimization (FRICO 2007), Universität Bayreuth

Sibylle Volz

24.01.2007 *Was bietet der KOBV für die Benutzer/Innen?*

Kolloquium für Berliner BibliotheksreferendarInnen, ZIB, Berlin

02.07.2007 *Suche in elektronischen Zeitschriften und Publikationen leicht gemacht – Neues vom KOBV-Volltextserver*

5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“, ZIB, Berlin

02.07.2007 *Auf dem Weg zur Bibliothek 2.0: Wie Bibliotheken den Dialog mit ihren Nutzer/Innen aktiv gestalten*

5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“, ZIB, Berlin

14.11.2007 *OPAC und mehr – Neue Suchräume für Bibliotheken: Der neue ASP-Dienst der KOBV-Zentrale aus bibliothekarischer Sicht*

9. Sun Summit Bibliotheken „Verfügbarkeit, Integrität, Authentizität“ – Reform, Umbruch und Modernisierung der digitalen Objekte, Deutsche Nationalbibliothek, Frankfurt am Main

06.12.2007 *Bibliothekssuchmaschine statt Bibliothekskatalog – Die neue Lucene-Anwendung der KOBV-Zentrale als ASP-Dienst*

KOBV-Workshop für Bibliotheken, ZIB, Berlin

Marcus Weber

30.01.2007 *Modelling Principles in Conformation Dynamics*

Matheon-ICM-Kooperationsworkshop, Warschau, Polen

01.02.2007 *Modelling Principles in Conformation Dynamics*

Seminar, FHI Berlin

19.03.2007 *Numerische Methoden in der Konformationsdynamik*

Seminar „Moleküle im Rechner“, ZIB

21.03.2007 *Dimension Reduction of Markov Chains and PCCA+*

IMPRS-Seminar, MPI für Molekulare Genetik, Berlin

Tino Weinkauff

31.01.2007 *Ingredients for a Virtual Topology Lab: feature extraction and visualization of flow fields*

Eingeladener Vortrag: Visualisierungskolloquium des Instituts für Visualisierung und Interaktive Systeme der Universität Stuttgart

08.06.2007 *Ingredients for a Virtual Topology Lab: feature extraction and visualization of flow fields*

Eingeladener Vortrag: International Workshop on Visualization of High-resolution 3D Turbulent Flows

01.11.2007 *Cores of Swirling Particle Motion in Unsteady Flows*

Vortrag auf der IEEE Visualization 2007, Sacramento, USA

Martin Weiser

- 16.01.2007** *Discretization Aspects of Interior Point Methods*
Workshop on Numerical Analysis of PDEs, Concepción, Chile
- 31.01.2007** *Therapy Planning in Hyperthermia*
Modelling in Life Sciences, ICM, Warschau, Polen
- 28.03.2007** *Discretization Aspects of Interior Point Methods*
Jahrestagung von DMV and GDM, Berlin
- 29.03.2007** *A multiscale model of thermoregulation in the cancer therapy regional hyperthermia*
Jahrestagung von DMV und GDM, Berlin
- 25.04.2007** *Function Space Interior Point Methods*
TU Darmstadt
- 17.07.2007** *Interior-point methods for semi-infinite problems with PDE constraints*
ICIAM 07, Zürich, Schweiz
- 20.07.2007** *A path-following method for parametric nonlinear complementarity problems*
ICIAM 07, Zürich, Schweiz
- 12.09.2007** *A multiscale model of thermoregulation in the cancer therapy regional hyperthermia*
ENUMATH 07, Graz, Österreich
- 19.09.2007** *Treatment planning in regional hyperthermia*
13th Czech-French-German Conference on Optimization, Heidelberg

Kati Wolter

- 29.09.2007** *Cutting Plane Separators in SCIP*
Future Research in Combinatorial Optimization (FRICO 2007), Universität Bayreuth
- 12.10.2007** *Cutting Plane Separators in SCIP*
SCIP Workshop 2007, ZIB, Berlin
- 03.12.2007** *Exact Integer Programming*
Kickoff-Meeting des DFG-Schwerpunktprogramms 1307 „Algorithm Engineering“, Karlsruhe

Stefan Zachow

- 31.01.2007** *Therapy Planning in Head Surgery*
Eingeladener Vortrag zum Polish-German Workshop on Modeling in Life Sciences, Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling, Warschau
- 22.02.2007** *Understanding Nasal Airflow via CFD Simulation and Visualization*
4th Int. Conf. on Computer Aided Surgery around the Head, Innsbruck, Austria
- 13.03.2007** *Computer Assisted Treatment Planning in Head Surgery*
Eingeladener Vortrag für die European Academy of Facial Plastic Surgery, 11th Winter Meeting, Flims-Laax, Switzerland
- 17.07.2007** *Analysis of Nasal Airflow Phenomena using CFD Simulations*
6th Int. Congr. on Industrial and Applied Mathematics, Zurich, Switzerland
- 14.10.2007** *Modellgestützte Therapien in der Medizin mit adaptiven Assistenzsystemen*
1. gemeinsamer CURAC/CARS MGT & AAS Workshop, Karlsruhe

- 29.10.2007** *Simulation and Visualization for Surgery Planning*
Tutorial: Advanced Visual Medicine: Techniques, Applications and Software, IEEE Visualization, Sacramento, CA, USA
- 22.11.2003** *3D Anatomierekonstruktion aus medizinischen Bilddaten: Segmentierung und Geometrieverarbeitung*
Eingeladener Vortrag zum CADFEM Users' Meeting auf der 25. ANSYS Konferenz, Dresden

Lin Zschiedrich

- 22.01.2007** *Goal oriented adaptive finite element method for precise simulations of optical components.*
Photonics West 2007, San Jose, USA
- 07.06.2007** *Computational Photonics: Modellierung, Numerik, Anwendersoftware*
Vortragsreihe „Fallstudien“, K. Nipp, ETH Zürich, Schweiz
- 24.07.2007** *Evaluation of Rayleigh-Sommerfeld diffraction formula for PML solution*
Waves 2007, Reading, Vereinigtes Königreich

B2: Vorlesungen und Seminare

Artur Andrzejak: HU Berlin

- SS 07** *Self-Management and Reliability* (Seminar)
- WS 07/08** *Proactive Management of Computer Systems* (Seminar)

Wolfgang Baumann: International University Bremen

- WS 06/07** *Parallel Programming with MPI and OpenMP* (Intersession Course)

Wolfgang Baumann: TU Berlin

- WS 06/07** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung)

Andreas Bley: Universität Karlsruhe

- WS 07/08** *Kombinatorische Optimierung in der Praxis* (Vorlesung mit Rechnerübungen)

Ralf Borndörfer: TU Berlin

- WS 06/07** *Ganzzahlige Optimierung im öffentlichen Verkehr* (Vorlesung, zusammen mit Christian Liebchen und Marc Pfetsch)
- WS 06/07** *Geometrische Varianten kombinatorischer Optimierungsprobleme* (Blockseminar, zusammen mit Martin Grötschel)

Ralf Borndörfer: FH Görlitz/Zittau

- WS 06/07** *Ganzzahlige Optimierung im Verkehr* (Blockvorlesung)

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 07 *Geometrische Funktionentheorie* (Vorlesung)

Peter Deuffhard: FU Berlin

SS 07, WS 07/08 *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing*

(Mitveranstalter: H. Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), R. März (HU), C. Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

SS 07, WS 07/08 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden*

(Mitveranstalter: R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), C. Schütte (FUB))

SS 07 *Projektseminar „Mathematik des Hörens“*

(Mitveranstalter: G. Teschke, M. Weiser, S. Zachow)

Martin Grötschel: TU Berlin

WS 06/07 *Linear and Integer Programming (ADM II)* (Vorlesung)

WS 06/07 *Geometrische Varianten kombinatorischer Optimierungsprobleme* (Blockseminar, zusammen mit Ralf Borndörfer)

SS 07 *Fortgeschrittene Methoden der ganzzahligen Linearen Programmierung (ADM III)* (Vorlesung)

SS 07 *Netzwerkoptimierung in Verkehr und Telekommunikation* (Blockseminar, zusammen mit Marika Neumann, Christian Raack und Thomas Schlechte)

Hans-Christian Hege: Hochschule für Digitale Medienproduktion, Elstal

WS 06/07 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

SS 07 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

WS 07/08 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

Benjamin Hiller: FHW Berlin

WS 06/07 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Andreas Tuchscherer)

WS 07/08 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Andreas Tuchscherer)

Arie M. C. A. Koster: TU Berlin

WS 06/07 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Vorlesung)

WS 06/07 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Übung)

Monika Kuberek: HU Berlin

WS 06/07 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)

SS 07 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)

Marika Neumann: TU Berlin

SS 07 *Netzwerkoptimierung in Verkehr und Telekommunikation* (Blockseminar, zusammen mit Martin Grötschel, Christian Raack, Thomas Schlechte)

Marc E. Pfetsch: TU Berlin

WS 06/07 *Ganzzahlige Optimierung im öffentlichen Verkehr* (Vorlesung, zusammen mit Ralf Borndörfer und Christian Liebchen)

Christian Raack: TU Berlin

SS 07 *Netzwerkoptimierung in Verkehr und Telekommunikation* (Blockseminar, zusammen mit Martin Grötschel, Marika Neumann und Thomas Schlechte)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

SS 07 *Programmierung mit Hardware Accelerators: FPGA, Clearspeed, GPU* (Seminar, zusammen mit Thomas Steinke und Thorsten Schütt)

SS 07 *Management verteilter Ressourcen im Grid* (Seminar, zusammen mit Thomas Röblitz)

SS 07 *Parallele und Verteilte Systeme* (Forschungsseminar)

WS 07/08 *Global Data Storage on Structured Overlays* (Seminar)

WS 07/08 *Parallele und Verteilte Systeme* (Forschungsseminar)

Achim Schädle: FU Berlin

WS 06/07 *Numerische lineare Algebra für Bioinformatiker* (Vorlesung)

Anton Schiela: FU Berlin

WS 07/08 *Nichtlineare Optimierung* (Vorlesung, gemeinsam mit Martin Weiser)

Thomas Schlechte: TU Berlin

SS 07 *Netzwerkoptimierung in Verkehr und Telekommunikation* (Blockseminar, zusammen mit Martin Grötschel, Marika Neumann und Christian Raack)

Frank Schmidt: FU Berlin

WS 06/07 *Computational Photonics* (Vorlesung)

Thomas Steinke: HU Berlin

SS 07 *Programmierung mit Hardware Accelerators: FPGA, Clearspeed, GPU* (Projektseminar, zusammen mit Alexander Reinefeld und Thorsten Schütt)

Thomas Steinke: TFH Berlin

WS 07/08 *Einführung in das Molecular Modeling* (Praktikum)

Rüdiger Stephan: TU Berlin

SS 07 *Analysis I für Ingenieure* (Übung)

WS 07 *Computerorientierte Mathematik I* (Übung)

Hinnerk Stüben: HU Berlin

WS 06/07 *Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler* (Vorlesung)

Hinnerk Stüben: International University Bremen

WS 06/07 *Parallel Programming with MPI and OpenMP* (Intersession Course)

Hinnerk Stüben: TU Berlin

WS 06/07 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung)

Gerd Teschke: Freie Universität Berlin

WS 06/07 *Inverse Probleme und Wavelet Analysis* (Vorlesung)

SS 07 *Projektseminar „Mathematik des Hörens“*
(Mitveranstalter: P. Deuffhard, M. Weiser, S. Zachow)

Andreas Tuchscherer: FHW Berlin

WS 06/07 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Benjamin Hiller)

WS 07/08 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Benjamin Hiller)

Martin Weiser: FU Berlin

WS 07/08 *Nichtlineare Optimierung* (Vorlesung, gemeinsam mit Anton Schiela)

SS 07 *Projektseminar „Mathematik des Hörens“*
(Mitveranstalter: P. Deuffhard, G. Teschke, S. Zachow)

Marcus Weber: FU Berlin

WS 07/08 *Simulation von Biomolekülen* (Vorlesung im Studiengang Bioinformatik)

SS 07 *Moleküle im Rechner* (Seminar im Fachbereich Mathematik)

WS 07/08 *Moleküle im Rechner* (Seminar im Fachbereich Mathematik)

B3: Mitveranstalter auswärtiger Tagungen**Artur Andrzejak**

28.08.–31.08.2007 *Topic 6: Grid and Cluster Computing*, Euro-Par 2007, Parallel Processing, 13th International Euro-Par Conference, Rennes, Frankreich

Ralf Borndörfer

12.10.2007 *WIP-MATHEON-Workshop Mathematics meets Economic*, WIP, TU Berlin

Wolfgang Dalitz

25.–30.03.2007 *Minisymposium „Mathematik und Internet: Kollaboratives Arbeiten im Web“ der Fachgruppe Information und Kommunikation (IuK)*, Jahrestagung 2007 der DMV/ÖMG in Berlin

Martin Grötschel

- 26.02.-02.03.2007** *Gemeinsame Tagung des CMM und des MATHEON: Rock Mechanics and Logistics in Mining*, CMM, Santiago de Chile, Chile
- 26.04.2007** *MATHEON AA-B Industry Day*, TU Berlin
- 20.-21.05.2007** *IMU Exekutivkomitee*, Oslo, Norwegen
- 10.07.2007** *MATHEON Sino-German Workshop: Nonlinear integer programming and structural optimization*, TU Berlin
- 12.-13.07.2007** *Treffen des Wissenschaftlichen Beirates des MATHEON*, TU Berlin
- 18.07.2007** *Telecom Day, ICIAM 2007*, Zürich, Schweiz
- 10.12.2007** *Workshop: Optimierung von Systemen, Innovationszentrum Energie*, TU Berlin

Hans-Christian Hege

- 29.01.-01.02.2007** *WSCG 2007 – International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2007 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Pilsen, Tschechien
- 04.-06.03.2007** *TopoInVis 2007 – Workshop on Topology-based Methods in Visualization (Program Co-Chair)*, Grimma
- 08.-09.03.2007** *Simulation and Visualization 2007 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Magdeburg
- 23.-25.05.2007** *EUROVIS 2007 – Eurographics/IEEE-VGTC Symposium on Visualization (Member of the Scientific Programme Committee)*, Norrköping, Schweden
- 02.-03.09.2007** *IEEE/EG International Symposium on Point-Based Graphics 2007 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Prag, Tschechien
- 03.-04.09.2007** *IEEE/EG International Symposium on Volume Graphics 2007 (Papers Chair)*, Prag, Tschechien
- 04.-05.10.2007** *CompLife 2007 – 2nd International Symposium on Computational Life Science (Area Chair Scientific Visualization)*, Utrecht, Niederlande
- 28.10.-01.11.2007** *IEEE Visualization 2007 (Member of the Program Committee)*, Sacramento, USA

Thorsten Koch

- 10.07.2007** *MATHEON Sino-German Workshop on Nonlinear Integer Programming and Structural Optimization*, TU Berlin

Arie M. C. A. Koster

- 01.-04.02.2007** *COST 293–295 Joint Workshop and 8th COST 293 Management Committee Meeting*, Maribor, Slowenien

Thomas Röblitz

- 9.05.2007** *Workshop The Astronomical Virtual Observatory - Building Operational Services on Pervasive Grids: Standards in Use*, Open Grid Forum 20, Manchester, Vereinigtes Königreich

Florian Schintke

11.09.2007 *Workshop Daten*, Erstes D-Grid All Hands Meeting, Göttingen

Wolfram Sperber

30.05.-01.06.2007 *IuK 2007, 13. Jahrestagung der IuK-Initiative Wissenschaft*, Köln

Thomas Steinke

27.06.2007 *Programmability of FPGAs for Application Developers*, BoF-Session, ISC 2007, Dresden

13.11.2007 *Open Standards for Reconfigurable Computing in a Hybrid Computing Environment*, BoF-Session, SC 2007, Reno, USA, zusammen mit Eric Stahlberg, Wallid Najjar, Martin Herbordt

ANHANG C: TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

C1: Gastvorträge

- 12.01.2007** Stefan Launer (Phonak AG, Schweiz):
Intelligente und voll-automatische Hörgeräte: Möglichkeiten und Grenzen
- 25.01.2007** Angelika Wiegele (Universität Klagenfurt, Österreich):
Mixing semidefinite and polyhedral relaxations in a Branch and Bound framework for solving the Max-Cut problem
- 26.01.2007** Ugo Pietropaoli (Università degli Studi di Roma „Tor Vergata“, Rom, Italien):
On the Recognition and the Stable Set Problem for Fuzzy Circular Interval Graphs
- 26.01.2007** Krzysztof Rzdca (ID-IMAG, Grenoble, Frankreich):
Game-theoretic Approaches to Grid Resource Management
- 14.02.2007** Mihyun Kang (HU Berlin):
Zufall in Algorithmen und Modellen für reale Probleme
- 05.04.2007** Lingfeng Niu (Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, Peking, China):
A new trust region method for nonlinear optimization
- 17.04.2007** Hans-Gerd Happel (Europa-Universität Viadrina Frankfurt/Oder):
Digitalisierung der alten Viadrina-Drucke – Einführung
- 17.04.2007** Thomas Jäger (Europa-Universität Viadrina Frankfurt/Oder):
Die Digitalisierung der alten Viadrina-Drucke
- 01.06.2007** Peter Sobe (Universität Lübeck):
libNetRAID – Eine Bibliothek zur effizienten ausfall-tolerierenden Kodierung
- 26.06.2007** Ivan Dovica (Karls-Universität Prag, Tschechien):
Defect Set Problem
- 26.06.2007** Sophie Michel (Universität Bordeaux, Frankreich):
Inventory Routing Problem
- 02.07.2007** Roland Bertelmann (Wissenschaftspark Albert Einstein, Potsdam):
Lucene für Bibliotheken – ein Service der KOBV-Zentrale
- 02.07.2007** Christine Große (Leibniz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei, Berlin):
Nationallizenzen
- 02.07.2007** Birgit Kammer (BTU Cottbus):
Opus in der BTU Cottbus
- 02.07.2007** Helmut Voigt (HU Berlin):
e-Books
- 02.07.2007** Birgit Zänker (FH Brandenburg):
Application Service Providing für Sisis-Systeme – ein Dienst des BVB
- 02.07.2007** Wolfgang Zick (HU Berlin):
Stand der Verhandlungen mit dem BVB

- 06.07.2007** Kevin Burrage (Department of Mathematics, The University of Queensland, Australien):
Multi-scale stochastic modelling of biochemical systems
- 09.07.2007** Ya-xian Yuan (Chinese Academy of Sciences, Peking, China):
An integer optimization problem from the Golmud-Lhasa railway
- 21.08.2007** Mihyun Kang (HU Berlin):
Living reviews
- 23.08.2007** Hoang Xoang Phu (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam):
Grob-Konvexität
- 31.08.2007** Daniel Dressler (Universität Dortmund):
Toughness of Sets of Vertices and Local Factors in Graphs
- 10.10.2007** Sleman Saliba (TU Kaiserslautern):
Approximation algorithms for a vehicle routing problem
- 16.10.2006** Ruud Egging (University of Maryland, USA):
Optimal Deployment of Repositionable Wireless Base Stations
- 30.10.2007** Olaf Schenk (Universität Basel, Schweiz):
Fortschritte in der linearen Algebra beim Lösen von Gleichungssystemen von Innere-Punkte-Methoden
- 06.12.2007** Roland Bertelmann (Wissenschaftspark Albert Einstein, Potsdam):
Lucene für Bibliotheken – erste Erfahrungen mit der Search Engine des Wissenschaftsparks Albert Einstein im Routinebetrieb
- 10.12.2007** Franz Kappel (Institut für Mathematik, Universität Graz, Österreich):
Control concepts in cardiovascular-respiratory modelling
- 11.12.2007** Xin Liu (ICMSEC, Peking, China):
Distance Geometry Problems and New Efficient Sampling Methods
- 11.12.2007** Peipei Yao (IAM, Peking, China):
Discussion on Modelling Financial Markets
- 12.12.2007** Holger Boche (TU Berlin und Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik, HHI):
Resource Allocation and Interference Functions for Wireless Communication
- 12.12.2008** Monika Hagedorn-Saupe (Institut für Museumsforschung, Berlin):
Deutsche und Europäische Digitale Bibliothek
- 12.12.2007** Slawomir Stanczak (TU Berlin):
Utility-based Distributed Power Control
- 12.12.2007** Gerhard Wunder (TU Berlin):
Dual Solutions for Practical Scheduling Problems
- 18.12.2007** Maren Martens (University of British Columbia, Kanada):
Convex Combinations of Single Source Unsplittable Flows

Anhang C2: Gastaufenthalte

- Birger Köblitz** (EGEE (Enabling Grids for E-science))
09.01.2007
- Jens-Peter Redlich** (Humboldt-Universität zu Berlin)
10.01.2007
- Balazs Dezsö** (Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Ungarn)
15.-20.01.2007

- Michael Hofmeister** (Siemens München)
23.01.2007
- Martin Müller** (Siemens München)
23.01.2007
- Krzysztof Rządca** (ID-IMAG, Grenoble, Frankreich)
24.-30.01.2007
- Angelika Wiegele** (Universität Klagenfurt, Österreich)
25.-26.01.2007
- Ugo Pietropaoli** (Università degli Studi di Roma „Tor Vergata“, Rom, Italien)
25.-26.01.2007
- Frank Dehne** (Carleton University, Ottawa, Kanada)
07.-09.02.2007
- Annegret K. Wagler** (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)
13.-15.02.2007
- Mihyun Kang** (HU Berlin)
14.02.2007
- Richard Kaufmann, Martin Walker** (Hewlett Packard, Palo Alto, USA und Frankreich)
14.02.2007
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Kista, Schweden)
14.02.2007
- Roland Pabel** (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn)
19.-23.02.2007
- Klaus Gottschalk, Peter Pullmann** (IBM)
23.02.2007
- Manuel Torrilhon** (Seminar für Angewandte Mathematik, Zürich, Schweiz)
27.02.2007
- Junjie Peng** (ERCIM fellowship)
01.03.-01.12.2007
- Simone Scacchi** (Dipartimento di Matematica, Università degli Studi di Pavia, Italien)
01.03.-31.05.2007
- Nelson Max** (University of California, Davis/Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, USA)
02.03.2007
- Jonathan Shewchuk** (University of California, Berkeley, USA)
19.03.2007
- Lingfeng Niu** (Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, Peking, China)
01.04.-30.09.2007
- Alfonso Calazzo** (Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern)
10.-11.04.2007
- Hans-Gerd Happel** (Europa-Universität Viadrina, Frankfurt/Oder)
17.04.2007
- Thomas Jäger** (Europa-Universität Viadrina, Frankfurt/Oder)
17.04.2007
- Georg Mnich** (Lunatic Interactive GmbH Berlin)
17.04.2007

- Nina Amenta** (University of California, Davis, USA)
21.05.2007
- Andreas Krawinkel** (Paderborn Center for Parallel Computing)
31.05.2007
- Markus Reuther** (FH Mittweida)
01.06.2007-29.02.2008
- Peter Sobe** (Universität Lübeck)
01.06.2007
- Karl Aberer** (EPFL, Lausanne, Schweiz)
08.06.2007
- Thomas Liebling** (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Schweiz)
13.-16.06.2007
- Erhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)
13.-15.06.2007
- Alfred Louis** (Lehrstuhl für Angewandte Mathematik, Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
14.-15.06.2007
- Ivan Dovica** (Karls-Universität Prag, Tschechien)
24.-29.06.2007
- Sophie Michel** (Universität Bordeaux, Frankreich)
25.-29.06.2007
- Albert Gilg** (Siemens München)
26.06.2007
- Michael Hofmeister** (Siemens München)
26.06.2007
- Frank Müller** (North Carolina State University, Raleigh, USA; AvH-Gastprofessor)
01.07.07-30.06.2008
- Roland Bertelmann** (Bibliothek des Wissenschaftsparks Albert Einstein, Potsdam)
02.07.2007
- Christine Große** (Bibliothek des Leibniz-Instituts für Gewässerökologie und Binnenfischerei,
Berlin)
02.07.2007
- Birgit Kammer** (Universitätsbibliothek der BTU Cottbus)
02.07.2007
- Alla Sheffer** (University of British Columbia, Vancouver, Kanada)
02.07.2007
- Helmut Voigt** (Universitätsbibliothek der HU Berlin)
02.07.2007
- Birgit Zänker** (Bibliothek der FH Brandenburg)
02.07.2007
- Wolfgang Zick** (Universitätsbibliothek der TU Berlin)
02.07.2007
- Ya-xian Yuan** (Chinese Academy of Sciences, Peking, China)
08.-11.07.2007
- Andreas Günther** (Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg)
09.07.2007
- Natashia Boland** (University of Melbourne, Australien)
16.-20.07.2007

- Irina Dumitrescu** (University of New South Wales, Australien)
16.-20.07.2007
- Arie M. C. A. Koster** (University of Warwick, Vereinigtes Königreich)
18.-19.07.2007
- Ross T. Whitaker** (University of Utah, Salt Lake City, USA)
23.07.2007
- Andreas Möller** (acatech – Deutsche Akademie der Technikwissenschaften, München)
01.08.2007
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Kista, Schweden)
08.08.2007
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Kista, Schweden)
15.-17.08.2007
- Volker Lindenstruth** (Universität Heidelberg)
14.-15.08.2007
- Gabriel Wittum** (Universität Heidelberg)
14.-15.08.2007
- Mihyun Kang** (HU Berlin)
21.08.2007
- Hoang Xoang Phu** (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam)
23.-24.08.2007
- Daniel Dressler** (Universität Dortmund)
28.08.-03.09.2007
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Kista, Schweden)
06.-07.09.2007
- Hamish Carr** (University College Dublin, School of Computer Science and Informatics, Dublin, Irland)
10.09.2007
- Sabrina Melchiona** (Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg)
24.-26.09.2007
- Ha Huy Khoai** (Institute of Mathematics, Hanoi, Vietnam)
28.09.2007
- Eberhard Knobloch** (TU Berlin)
28.09.2007
- Sleman Saliba** (TU Kaiserslautern)
10.-12.10.2007
- Ruud Egging** (University of Maryland, USA)
15.-19.10.2007
- Kai Hormann** (Technische Universität Clausthal)
22.10.2007
- Nicola Haller** (medi-päd, Friedberg)
29.10.2007
- Kornelia Sammet** (FU Berlin)
31.10.2007
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science)
06.-09.11.2007
- Artin Avanes** (Institut für Informatik, Humboldt-Universität zu Berlin)
02.11.2007

- Mark Pauly** (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz)
12.11.2007
- Randy Göbel** (University of Alberta, Edmonton, Kanada)
14.11.2007
- Falk Schreiber** (IPK Gatersleben / Universität Halle)
20.11.2007
- Christian Klukas** (IPK Gatersleben / Universität Halle)
20.11.2007
- Hélio Lopes** (Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasilien)
26.11.2007
- Quan Wang** (Bio-Campus Westend, Johann-Wolfgang Goethe Universität Frankfurt am Main)
29.11.2007
- Xin Liu** (Chinese Academy of Sciences, Peking, China)
03.12-14.12.2007
- Peipei Yao** (Chinese Academy of Sciences, Peking, China)
03.12-14.12.2007
- Roland Bertelmann** (Bibliothek des Wissenschaftsparks Albert Einstein, Potsdam)
06.12.2007
- Britta Baron** (University of Alberta, Edmonton, Kanada)
12.12.2007
- Holger Boche** (TU Berlin und Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik, HHI)
12.12.2007
- Monika Hagedorn-Saupe** (Institut für Museumsforschung, Berlin)
12.12.2007
- Slawomir Stanczak** (TU Berlin)
12.12.2007
- Gerhard Wunder** (TU Berlin)
12.12.2007
- Arie M. C. A. Koster** (University of Warwick, Vereinigtes Königreich)
17.-21.12.2007
- Manuel M. Oliveira** (Federal University of Rio Grande do Sul, Brasilien)
17.12.2007
- Maren Martens** (University of British Columbia, Kanada)
18.12.-19.12.2007

Anhang C3: Tagungen und Veranstaltungen

- 24.01.2007** Kolloquium für Berliner BibliotheksreferendarInnen: „Der KOBV – der regionale Bibliotheksverbund in Berlin und Brandenburg“
Veranstalter: Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Sibylle Volz (KOBV-Zentrale)
- 14.02.2007** MediGrid-Workshop
Veranstalter: Thomas Steinke
- 15.-16.02.2007** Selfman-Meeting
Veranstalter: Monika Moser, Thorsten Schütt

- 22.02.2007** XtreamOS WP32
Veranstalter: Felix Hupfeld
- 01.-02.03.2007** Zwischenbegutachtung D-Grid
Veranstalter: Alexander Reinefeld
- 09.06.2007** Visuelle Datenanalyse – Eröffnung des Studios da Vinci
Veranstalter: Hans-Christian Hege
- 02.07.2007** 5. KOBV-Forum „10 Jahre KOBV – Strategien für die Zukunft“
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 23.07.2007** Visuelle Datenanalyse – Wiederholungstermin zur Eröffnung des Studios da Vinci
Veranstalter: Hans-Christian Hege
- 08.10.-10.10.2007** Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation
Veranstalter: Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin
- 11.-12.10.2007** SCIP-Workshop 2007
Veranstalter: Tobias Achterberg, Timo Berthold, Marc Pfetsch, Kati Wolter
- 06.12.2007** KOBV-Workshop „Bibliothekssuchmaschine statt Bibliothekskatalog – Die neue Lucene-Anwendung der KOBV-Zentrale für Bibliotheken“
Veranstalter: Karin Herm, Sibylle Volz (KOBV-Zentrale)
- 12.12.2007** Gemeinsamer Workshop mit der TU-AG Mobilkommunikation
Veranstalter: Martin Grötschel

Anhang C4: Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 19.03.-22.03.2007** 3. Leipziger Kongress für Information und Bibliothek „Information und Ethik“ Leipzig
Veranstalter: Demonstration der KOBV-Dienste, u. a. Fernleihe, Portal, Volltextserver
Veranstalter: KOBV-Zentrale

Anhang C5: 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.

- 18.01.2007** Mathematische Optimierung in der Praxis, Hildegard-Wegscheider-Schule, Berlin
Veranstalter: Martin Grötschel
- 13.02.2007** Besuch von Studenten der TU Berlin
Veranstalter: Wolfgang Baumann
- 15.02.2007** Besuch einer Schülergruppe der Romain-Rolland Oberschule, Reinickendorf
Veranstalter: Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Björn Meyer, Olaf Paetsch, Britta Weber
- 16.02.2006** Mathematik ist überall — insbesondere in der Medizin, Kopernikus-Gymnasium
Blankenfelde
Veranstalter: Martin Weiser
- 21.02.2007** Wie baut man einen Computer? Von Konrad Zuses Z1 zum Supercomputer, Der
schnellste Weg zum Ziel – die Mathematik im Routenplaner, Kopernikus-Gymnasium,
Blankenfelde
Veranstalter: Alexander Reinefeld, Andreas Tuchscherer
- 03.04.2007** Besuch einer Gruppe von Mathematik- und Informatiklehrern im Rahmen des
Ausflugprogrammes des 98. MNU-Bundeskongresses in Berlin
Veranstalter: Sven Burger, Peter Deuffhard, Hans Lamecker, Henning Stüben, Gerd
Teschke, Marcus Weber
- 16.04.2007** Besuch von Kindern der rbb-Sendung Ohrenbär
Veranstalter: Wolfgang Baumann
- 24.04.2007** Präsentation des MATHEON, Besuch des Märkischen Presse- und Wirtschaftsclubs,
TU Berlin
Veranstalter: Martin Grötschel
- 26.04.2007** Geld liegt auf der Straße, Berliner Wirtschaftsgespräche „Forschung vor Ort“, ZIB
Veranstalter: Peter Deuffhard, Martin Grötschel, Alexander Reinefeld
- 26.04.2007** 1-2-3 meins, Bieten um die Wette, Girls' Day, ZIB und FU-Berlin
Veranstalter: Thorsten Koch, Marika Neumann, Thomas Schlechte
- 26.04.2007** 3D-Wissenschaftskino, Girls' Day, ZIB und FU-Berlin
Veranstalter: Maria Gensel, Dagmar Kainmüller, Olaf Paetsch
- 05.05.2007** Sudoku vs. Graphenfärbung, Der schnellste Weg zum Ziel, Wer traut noch dem
Computer? – 12. Tag der Mathematik, TFH Berlin
Veranstalter: Timo Berthold, Ralf Borndörfer, Martin Weiser
- 12.05.2007** Projekt Trassenbörse, Transport und Logistik 2007, Neue Messe München
Veranstalter: Thomas Schlechte
- 31.05.2007** Exploring the surface of liquid nanoparticles, Posterpräsentation, DFG-FG463
Veranstalter: Alexander Riemer, Marcus Weber
- 23.05.2007** Besuch einer Schülergruppe der Fachoberschule OSZ Druck- und Medientechnik,
Reinickendorf
Veranstalter: Sven Burger, Hans Lamecker, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Tino Weinkauff
- 31.05.2007** 3D-Wissenschaftskino – das Studio da Vinci, Präsentation für ZIB-Mitarbeiter,
Gastwissenschaftler und Studenten der TU Kaiserslautern
Veranstalter: Ralf Kaehler, Björn Meyer, Steffen Prohaska
- 01.06.2007** 3D-Wissenschaftskino, Präsentation für Studenten der German Film School
Veranstalter: Ralf Kaehler
- 05.06.2007** Wer traut noch dem Computer?, Sudoku vs. Graphenfärbung, 1-2-3 meins, Bieten
um die Wette – Projektwoche der Herder-Oberschule an der Freien Universität Berlin
Veranstalter: Timo Berthold, Marika Neumann, Thomas Schlechte, Martin Weiser

08.06.2007 Besuch einer Studentengruppe der Graduate School „Mathematics as a Key Technology“ der Universität Kaiserslautern

Veranstalter: Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Jan Pomplun, Steffen Prohaska, Gerd Teschke, Marcus Weber

09.06.2007 Ein wichtiger Termin für die Außendarstellung des ZIB ist die jährliche Teilnahme an der „Langen Nacht der Wissenschaften“.

Erfreulicherweise sind die Besucherzahlen 2007 wieder kräftig auf fast 1.500 Personen angestiegen. 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 vertretenden Anwendungsprojekten geboten: z. B. Wegeoptimierung, Nano-Optik, Bibliothekswesen und Medizin auch mal unter anderen Gesichtspunkten. Die Supercomputerführungen wurden von fast 200 Besuchern besucht. Nicht nur Kinder zog das Basteln an Computern magisch an. Darüber hinaus wirkte auch wieder Horst Zuse mit interessanten Vorträgen zur Geschichte der Computer mit. Mit Beiträgen (Vorträge, Stände) waren an der Langen Nacht der Wissenschaften beteiligt:

- Wolfgang Baumann: Supercomputer und Datenroboter
- Timo Berthold: Sudoku vs. Graphenfärbung
- Sven Burger: Nanooptik: Computer-Simulationen überraschende Eigenschaften des Lichts
- Prof. Peter Deuffhard: Was ist ein schönes Gesicht?
- Maria Gensel: 3D-Wissenschaftskino
- Ralf Kähler: 3D-Wissenschaftskino
- Dagmar Kainmüller: 3D-Wissenschaftskino
- Bernd Kallies: Supercomputer und Datenroboter
- Michael Koppitz: 3D-Wissenschaftskino
- Anja Kuß: 3D-Wissenschaftskino
- Jan Nietfeld: 3D-Wissenschaftskino
- Olaf Paetsch: Gesamtleitung
- Christoph Petz: 3D-Wissenschaftskino
- Steffen Prohaska: 3D-Wissenschaftskino
- Christian von Prollius: ZIB-DMS
- Matthias Rättsch: Gesichtserkennung und 3D-Gesichtsmodellierung
- Thomas Schlechte: Kürzeste Wege - Ein Klassiker der Graphentheorie
- Johannes Schmidt-Ehrenberg: 3D-Wissenschaftskino
- Philip Schröder: TSP-Gesichter
- Heiko Seim: 3D-Wissenschaftskino
- Wolfram Sperber: Das mathematische Gedächtnis
- Thomas Steinke: Supercomputer und Datenroboter
- Hinnerk Stüben: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Gerd Teschke: Gesichtserkennung und 3D-Gesichtsmodellierung
- Roland Tuschl: ZIB-DMS
- Sibylle Volz: Die Bibliothek 2.0 der Zukunft
- Bertram Wölk: TSP-Gesichter
- Stefan Zachow: Kinderprogramm
- Horst Zuse: Ursprung des Computers

- 14.06.2007** Angewandte Mathematik, Schülervortrag: Waldorfschule Kreuzberg, Berlin
Veranstalter:
- 03.07.2007** Raumstrategien: Darstellung von Konformationsräumen, Seminarbeitrag: Kunst-
hochschule Weikensee
Veranstalter: Marcus Weber
- 03.07.2007** Besuch des Leistungskurs Mathematik des Siemens Gymnasiums Berlin-Zehlendorf
am ZIB
Veranstalter: Steffen Prohaska
- 19.07.2007** Repräsentanten der Volkswagen-AutoUni, Wolfsburg
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Tino Weinkauff
- 22.08.2007** Besuch einer Kultur- und Integrationsgruppe des Afrika-Kulturinstituts Berlin
Veranstalter: Hans Lamecker, Detlef Kehl, Jan Sahner
- 04.09.2007** Besuch einer Schülergruppe des Gymnasiums Holthausen
Veranstalter: Timo Berthold, Martin Grötschel, Bernd Kallies, Olaf Paetsch
- 04.09.2007** Schlüsseltechnologie Mathematik, Vortrag vor einer Schülergruppe aus Hattingen
Veranstalter: Martin Grötschel, Olaf Paetsch
- 05.09.2007** Schülerbesuch im Rahmen eines Schülerseminars des FB Mathematik der FUB
Veranstalter: Sven Burger, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Anja Kuß, Olaf Paetsch
- 20.09.2007** Besuch des Informatikkurses der 10. Klasse aus der Luisenschule Bielefeld
Veranstalter: Artur Andrzejak, Wolfgang Baumann, Kathrin Peter
- 30.09.2007** Sudoku vs. Graphenfärbung, Schülervortrag, ZIB
Veranstalter: Timo Berthold
- 09.10.2007** Computational Drug Design, Aussteller auf der BioTechnica, Hannover
Veranstalter: Marcus Weber, Alexander Bujotzek
- 10.10.2007** Mobilität für Behinderte durch Mathematik, Berufsfachschule für Sozialwesen,
Berlin
Veranstalter: Ralf Borndörfer
- 14.10.2007** Bus-Umlaufplanung, MATHEON-Grundschulprojekt „Wege“, Wartburg-Grundschule
Berlin-Moabit
Veranstalter: Marc Pfetsch
- 15.10.2007** Visualisierung und Datenanalyse – Präsentation für Mitarbeiter der Firma Scholz
& Friends im Visualisierungsstudio da Vinci am ZIB.
Veranstalter: Vincent Dercksen
- 22.10.2007** Besuch einer Schülergruppe des Albert-Schweitzer Gymnasiums Eisenhüttenstadt
Veranstalter: Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Christoph Petz, Thomas Schlechte, Martin
Weiser
- 25.10.2007** Visualisierung und Datenanalyse, Studenten der German Film School
Veranstalter: Björn Meyer
- 30.10.2007** Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr, MATHEredaktiON 2007, ZIB, Ber-
lin
Veranstalter: Marc Pfetsch
- 08.11.2007** Visualisierung und Datenanalyse – Präsentation für eine EU-Projektgruppe im
Visualisierungsstudio da Vinci am ZIB
Veranstalter: Stefan Zachow
- 13.11.2007** Mathematische Methoden im Drug Design, Vortrag an der Urania Berlin
Veranstalter: Marcus Weber

- 06.12.2007** Produktions- und Innovationsfaktor Mathematik, Rotary Club Berlin-Nord, Berlin
Veranstalter: Martin Grötschel
- 30.11.2007** Vortrag mit 3D-Molekülvisualisierung, Auf den Spuren des Nasensprays - RhinoCFD: Mathematische Simulationen der Nasenatmung – Festveranstaltung des Matheson anlässlich der Überreichung der Urkunde zum Ort im „Land der Ideen“ und als Auftakt zum „Digitalen Adventskalender“, TU Berlin
Veranstalter: Hans-Christian Hege, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Stefan Zachow
- 12.12.2007** Der Fußball und das Geld, Tag der Naturwissenschaften an der Kurt-Tucholsky-Oberschule Berlin-Pankow
Veranstalter: Marc Pfetsch