

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 1997



Vorbemerkung

Das vergangene Jahr 1997 war für uns das erste durchgängige Jahr in unserem Neubau, der national wie international zu Recht gewürdigt wird. Der an angelsächsischen Vorbildern orientierte Campus hat Gestalt angenommen. Unsere Arbeit ist mit neuem Schwung weitergegangen.

In einer Hinsicht war 1997 das Jahr der *Begutachtungen*: Ende 96 / Anfang 97 wurden Präsident und Vizepräsident in ihrer Funktion als Mitglieder der Berliner Universitäten im Zuge der vom Senat in Auftrag gegebenen vergleichenden Begutachtung der naturwissenschaftlichen Fachbereiche der drei Berliner Universitäten evaluiert — mit äußerst positivem Resultat; insbesondere wurde hierbei der Beitrag des ZIB in Lehre und Forschungskooperation in die Berliner Universitätslandschaft hinein gewürdigt. Im März stand das ZIB als ganzes auf dem Prüfstand innerhalb einer (ebenfalls vom Berliner Senat gewünschten) vergleichenden Evaluation durch den Wissenschaftsrat; gerade diese Begutachtung hat uns dezidiert den Rücken gestärkt, unseren derzeitigen Status voll bestätigt und uns ermutigt, auf dem von uns eingeschlagenen Weg wie von uns geplant voranzuschreiten. Schließlich hat noch der Wissenschaftliche Beirat des ZIB im Mai getagt und uns ein vorzügliches Zeugnis ausgestellt; in seiner Stellungnahme für den Verwaltungsrat wird u.a. “festgestellt, daß das ZIB mit unverminderter Stoßkraft und Vitalität stets neue, ehrgeizige Aufgaben angeht und bewältigt”. Wir nehmen all dies als Ermutigung in durchaus nicht einfachen Zeiten.

Im Februar ist *Jürgen Gottschewski*, langjähriger Leiter unseres *Rechenzentrums* sowie Mitgestalter des ZIB in seiner heutigen Form, in den Ruhestand getreten. Wie erwartet, ist sein Weggang schwer zu verkraften. Mit seiner Mithilfe ist es uns dennoch gelungen, auch für die Zukunft unsere Option als eines der wenigen überregionalen HPSC-Zentren (HPSC = High Performance Scientific Computing) zu wahren. Bemühungen um seine Nachfolge im Rahmen einer S-Professur gemeinsam mit der Humboldt-Universität zu Berlin dauern noch an.

Im Bereich der *Forschung und Entwicklung* ist rege Wegberufung unserer jungen Wissenschaftler zu verzeichnen: Herr Bornemann hat mit 30 Jahren einen C4-Ruf an die TU München (Nachfolge Bulirsch) erhalten, die Herren Schultz und Koepf sind Rufen auf Professuren nach Leipzig gefolgt. Diese im Prinzip sehr erfreuliche Situation wird uns jedoch zukünftig im ZIB vor personelle Probleme stellen. Es bleibt noch mit Freude zu erwähnen, daß Herr Weismantel den hochdotierten Gerhard-Hess-Preis der DFG für Nachwuchswissenschaftler bekommen hat.

Im Bewußtsein der Dynamik unseres Hauses, ihrer Chancen ebenso wie ihrer Risiken, übergeben wir diesen Jahresbericht unseren Freunden, Gönnern und aufmerksamen Beobachtern.

Berlin, im März 1998

Prof. Dr. Peter Deuffhard
Präsident



Neubau des Konrad-Zuse-Zentrums in Berlin-Dahlem

Inhaltsverzeichnis

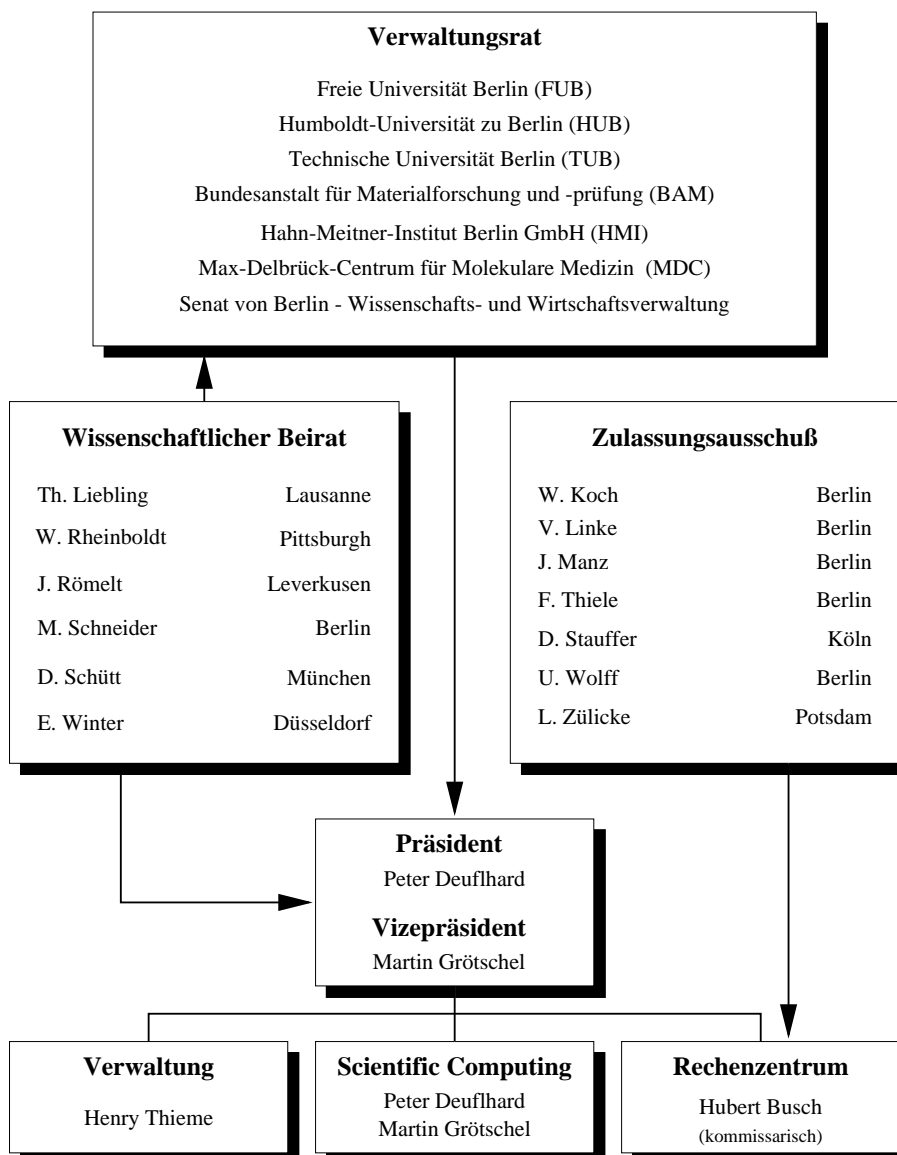
1	Das ZIB — Struktur und Ziele	1
2	Forschung und Entwicklung	5
2.1	Überblick	5
2.2	Schwerpunkte	13
2.2.1	Wesentliche Moleküldynamik	13
2.2.2	Quanten–klassische Dynamik	18
2.2.3	Adaptive Multilevel-FEM	22
2.2.4	Prozeßsimulation	28
2.2.5	Hochfrequente Elektrotechnik	33
2.2.6	Medizinische Planungssysteme	39
2.2.7	Virtuelle Labors	44
2.2.8	Allgemeine Relativitätstheorie	49
2.2.9	Invarianzeigenschaften dynamischer Systeme	52
2.2.10	Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie	56
2.2.11	Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme	62
2.2.12	Zahlentheoretische und geometrische Methoden	67
2.2.13	Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen . . .	73
2.2.14	Telekommunikation	80
2.2.15	Stochastische Optimierung und Anwendungen	87
2.3	Auszeichnungen und Rufe	92
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	93
3.1	Überblick	93
3.2	Schwerpunkte	95
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	95
3.2.2	Verteiltes Informationssystem für die Mathematik in Deutschland	97
3.2.3	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	103
3.2.4	Fachinformationssysteme für das Gebiet ‘Scientific Visualiza- tion’	105
3.2.5	WWW-Labors für numerische Software	107
3.2.6	REDUCE	108

4	Rechenzentrum	111
4.1	Überblick	111
4.2	Höchstleistungsrechner	112
4.2.1	Installation des Rechners CRAY T3E	113
4.2.2	Systemkonfiguration	116
4.2.3	Software-Ausstattung	118
4.2.4	Zulassungsausschuß	120
4.2.5	Großprojekte	121
4.3	Fachberatung	121
4.3.1	Chemie	122
4.3.2	Ingenieurwissenschaften	124
4.3.3	Physik	125
4.4	Projekte des Rechenzentrums	127
4.4.1	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	127
4.4.2	Kooperation mit der BAM	130
4.4.3	UNICORE	131
4.5	Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren	131
4.5.1	Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV)	131
4.5.2	Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)	132
4.5.3	Zusammenarbeit mit weiteren HPSC-Zentren	133
4.6	Interne Rechenzentrumsdienste	135
5	Publikationen	137
5.1	Preprints	137
5.2	Technical Reports	162
5.3	Mitherausgabe von Zeitschriften	168
5.4	Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	169
5.5	Monographien	174
5.6	Habilitationen	174
5.7	Dissertationen	174
5.8	Diplomarbeiten	175
6	Produkte	179
6.1	Modulare Visualisierungsumgebungen	179

6.2	LicFactory	179
6.3	SoPlex	180
6.4	DOC++	181
6.5	Verfahren aus der Computeralgebra	181
6.6	CodeLib	183
6.7	KASKADE-Toolbox	185
6.8	Informationsdienste des eLib-Servers	185
6.9	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	186
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	187
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	187
7.2	Vorlesungen und Seminare	209
8	Tagungen und Gäste des ZIB	213
8.1	Gastvorträge am ZIB	213
8.2	Gastaufenthalte am ZIB	216
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	217
8.4	Mitveranstalter von Tagungen	218
8.5	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	220
9	Organisatorisches	223
9.1	Organe	223
9.2	Satzung	223
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	224
9.4	Mitgliedschaften	224
9.5	ZIB-Fellows	225
9.6	Selbstverwaltung	225
9.7	Wirtschaftliche Situation	225
9.8	Personelle Entwicklung	226
10	Ansprechpartner	227

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. Zugleich bietet es Höchstleistungsrechnerkapazität als dazugehörige Dienstleistung an. Das ZIB wurde 1984 durch Gesetz als Anstalt des öffentlichen Rechts gegründet.



(Stand: 01.01.1998)

Forschung und Entwicklung: Scientific Computing

Schwerpunkt der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des ZIB ist das Gebiet *Scientific Computing*. Dieses Gebiet umfaßt

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

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

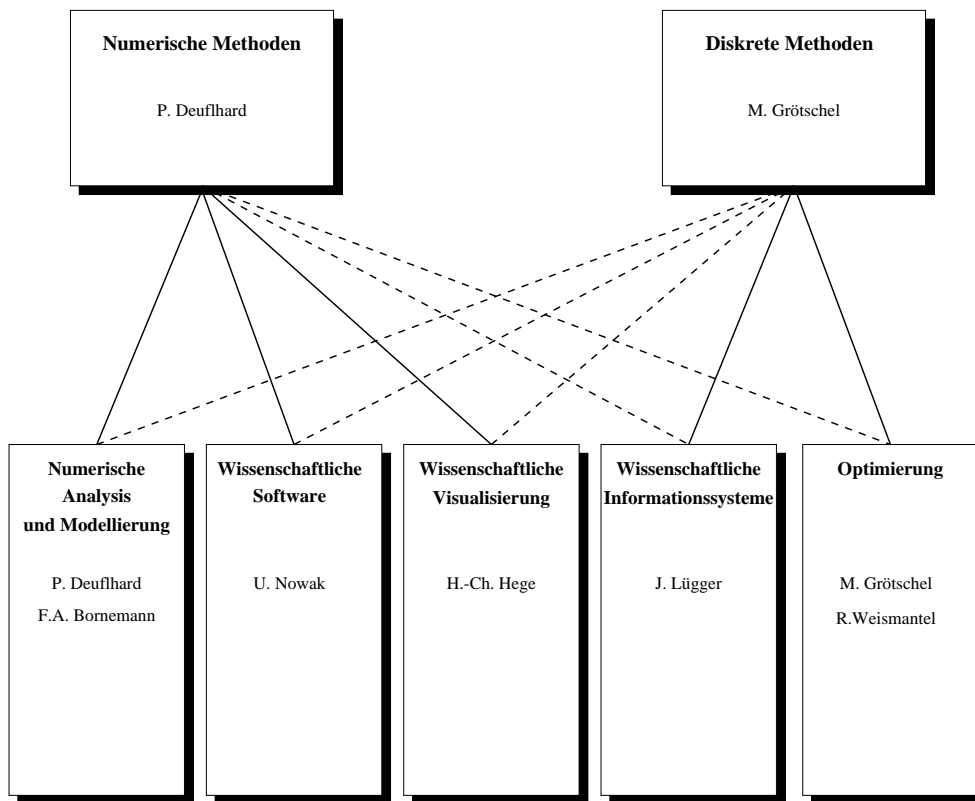
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

Das ZIB leistet Beiträge zur Lösung drängender Fragen in Wissenschaft, Technik, Umwelt oder Gesellschaft, die mit herkömmlichen Methoden nicht gelöst werden können, aber mathematischer Analyse zugänglich sind. Der Anteil des ZIB besteht dabei in der Entwicklung innovativer Algorithmen und dem Einsatz von Höchstleistungsrechnern in enger Zusammenarbeit mit Partnern aus Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft. Neben Kooperationen mit wissenschaftlichen Einrichtungen betreibt das ZIB zur Zeit gemeinsame Projekte mit Partnern aus den Bereichen Telekommunikation, Medizin, öffentlicher Nahverkehr und Logistik, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energie-Versorgung, Maschinen- und Fahrzeugbau. Das ZIB ist für die Durchführung weiterer wissenschaftlicher Projekte offen.

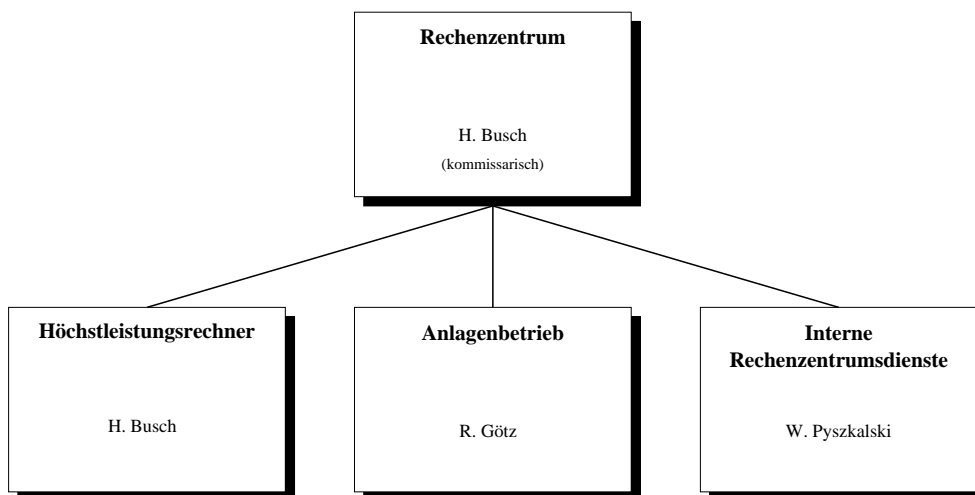
Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer, derzeit des Herstellers CRAY/SGI) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen im Land Berlin. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus allen anderen, insbesondere den neuen Bundesländern zur Verfügung. Über die Zuteilung von Rechenzeit an Großprojekte entscheidet ein Zulassungsausschuß. In allen vom Zulassungsausschuß befürworteten Projekten arbeitet mindestens ein Mitarbeiter des ZIB mit. Im Rahmen von Kooperationen können Anwender aus Industrie und anderen Bereichen auf die Höchstleistungsrechner des ZIB zugreifen.

Bereich Scientific Computing



Bereich Rechenzentrum



(Stand: 01.01.1998)

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 bei komplexen technologischen Problemen. Derzeit behandelte Hauptanwendungsgebiete sind Moleküldynamik sowie hochfrequente Elektrotechnik unter Einschluß der integrierten Optik.

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

Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung. Aufgabe ist die Entwicklung und Implementierung von Darstellungsmethoden und Algorithmen im Bereich wissenschaftliche Visualisierung. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind medizinische Therapieplanung, Neurobiologie und Moleküldynamik. Die Abteilung stellt Visualisierungs-Software und -Hardware zur Verfügung und unterstützt hausinterne Anwender bei der Realisierung komplexer Visualisierungsprojekte.

Diskrete Methoden

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

Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme. Aufgaben sind die Konzeption, die Entwicklung und die Realisierung mathematischer Informationssysteme der elektronischen Bibliothek eLib¹ für mathematische Software. Beispielhaft für Internet-basierte Informationstechnologie werden die Projekte “Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)” und “Informationstechnische Werkzeuge für Museen” durchgeführt. Im Projekt “Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)” werden die eigenständigen lokalen Bibliothekssysteme der wissenschaftlichen Bibliotheken auf der Basis offener Schnittstellen vernetzt. Die Bestände werden durch eine Suchmaschine mit Fremd- und Normdatenangebot im Sinne eines gemeinsamen virtuellen Kataloges erschlossen.

¹<http://elib.zib.de>

2 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 sowie die über das Jahr hinausreichenden Perspektiven gegeben werden. Typisch für das Gebiet *Scientific Computing* ist eine enge Verflechtung zwischen theoretisch angelegten Grundlagenprojekten, in denen neue Methoden bereitgestellt werden, und auf die Praxis ausgerichteten Anwendungsprojekten. Im nachfolgenden Kapitel 2.2 werden die verschiedenen Schwerpunkte der Forschung und Entwicklung zusammen mit wenigen herausgehobenen Einzelprojekten aufgeführt.

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

- Wesentliche Moleküldynamik
- Quanten-klassische Dynamik
- Adaptive Multilevel-FEM
- Virtuelle Labors

behandelt, zum Teil als Fortführung von Themen aus den vorigen Jahren mit veränderter Zielsetzung und neuen Ideen. Aus der Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit in

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Medizin: Therapieplanung
- Elektrotechnik: Integrierte Optik
- Chemie- und Verfahrenstechnik: Prozeßsimulation
- Physik: Allgemeine Relativitätstheorie
- Biologie: Hirnforschung

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

Wesentliche Moleküldynamik. Wie im Vorjahr suchte die Arbeitsgruppe des ZIB nach neuen Wegen zur Lösung von Fragen, die etwa beim Entwurf von neuen Medikamenten auftreten. Im Vordergrund stand die Entwicklung von Methoden zur Berechnung

der *wesentlichen* Eigenschaften Hamilton'scher dynamischer Systeme mit zeitlicher Multiskalenstruktur, wie sie eben gerade in der Molekülphysik vorliegen. Die eine der beiden von uns verfolgten Forschungslinien ist die *Elimination schneller Freiheitsgrade*. Dazu wurde im Berichtszeitraum eine Habilitationsschrift über *Homogenisierung in der Zeit* abgeschlossen, deren wichtigstes Resultat die Herleitung eines *schwachen Virialsatzes* ist, der sich als Verallgemeinerung des klassischen Virialsatzes (Gleichheit von kinetischer und potentieller Energie im zeitlichen Mittel) darstellt. Mit seiner Hilfe lassen sich neue zeitgemittelte Hamilton'sche Differentialgleichungen gewinnen, welche die Dynamik auf größeren Zeitskalen beschreiben. Theoretische Querverbindungen existieren unmittelbar zum Schwerpunkt "Quanten-klassische Dynamik".

Die andere von uns verfolgte Linie ist die *direkte Berechnung chemischer Konformationen* und Konformationsänderungen, wo wir Ende 97/Anfang 98 einen theoretischen und algorithmischen Durchbruch erzielen konnten. Ein erster, bereits Ende 96 vorgeschlagener Zugang über das Eigenwertproblem des zum dynamischen Fluß gehörigen Perron-Frobenius-Operators führte bei genauerer Analyse zu Schwierigkeiten sowohl im theoretischen Verständnis als auch in der algorithmischen Komplexität. Beide Schwierigkeiten konnten im Berichtszeitraum durch Übergang zu einem nur im Ortsraum definierten Markov-Operator behoben werden. Der neue Operator hat nun genau die wünschenswerten Spektraleigenschaften. Darüber hinaus gestattet er eine maßgeschneiderte Diskretisierung durch hybride Monte-Carlo-Methoden, womit auch der "Fluch der Dimension" vermieden werden kann. Die im Zusammenhang mit dem neuen Zugang aufgeworfenen Grundlagenfragen sollen innerhalb des DFG-Schwerpunktes "Dynamische Systeme" (Sprecher: B. FIEDLER, FU Mathematik, Kooperation: Arbeitsgruppe DELLNITZ, FB Mathematik Universität Bayreuth) geklärt werden. Zugleich liegt damit auch ein erster Baustein für unser geplantes Projekt *Virtuelles RNA-Labor* innerhalb des Berliner RNA-Technologie-Netzwerkes BeRNAT vor (Sprecher: V. ERDMANN, FU Biochemie); dessen Förderung durch das BMBF, das Land Berlin sowie die Industrie wird hoffentlich endlich in der ersten Hälfte des Jahres 98 verwirklicht werden – siehe auch Bezüge zu den Schwerpunkten "Quanten-klassische Dynamik" und "Virtuelle Labors". Als Ausweis unserer internationalen Aktivitäten in diesem Fachgebiet darf auch das "Second International Symposium on Algorithms for Macromolecular Modelling" gelten, das im Mai 97 die internationale Crème des Gebietes am ZIB zusammengeführt hat.

Quanten-klassische Dynamik. Die volle quantenmechanische Simulation molekularer Systeme ist auf absehbare Zeit jenseits des Rechenbaren. Deshalb gilt sogenannten *gemischt quanten-klassischen* Modellen (QCMD) verstärktes Augenmerk. Dieser bereits im Vorjahr existierende Schwerpunkt konnte im Berichtsjahr mit schönen Erfolgen ausgebaut werden. Insbesondere erwies sich die im vorigen Schwerpunkt bereits erwähnte *Homogenisierung in der Zeit* auch hier als nützliches analytisches Instrument. Mit ihrer Hilfe konnte die QCMD-Approximation auch über den Fall der Resonanz von Energie-Eigenwerten (TAKENS-Chaos) hinaus fortgesetzt werden. Über Codimension 1 hinaus konnten die im adiabatischen Grenzfall auftretenden Trichterlösungen zusätzlich durch

eine statistische Belegung derart modifiziert werden, daß sie in einfachen Modellproblemen die volle quantenmechanische Dynamik korrekt widerspiegeln. Sollte sich diese Beobachtung nicht nur in Modellproblemen, sondern in Problemen der realen Molekülphysik erhärten, so wäre der Nachweis erbracht, daß die QCMD-Approximation signifikant robuster ist als die derzeit in nahezu allen Softwarepaketen implementierte Born-Oppenheimer-Approximation. Auch die Entwicklung effizienter numerischer QCMD-Integratoren wurde von uns zügig vorangetrieben. Im Vorjahr hatten wir bereits den von uns entwickelten symplektischen Integrator PICKABACK vorgestellt.

Im Berichtszeitraum wurden darüber hinaus neue, nicht-symplektische sogenannte *exponentielle* QCMD-Integratoren in Kooperation mit der Arbeitsgruppe LUBICH, (FB Mathematik, Universität Tübingen) entwickelt. Sämtliche QCMD-Integratoren wurden in ein von uns erstelltes Softwarepaket QCMD++ eingebettet. Daneben wurden interessante neue Beweismethoden für die exponentiell lange Erhaltung von adiabatischen Invarianten bei symplektischer Diskretisierung Hamilton'scher Systeme in einer Habilitationsschrift vorgelegt – siehe Schwerpunkt "Invarianzeigenschaften dynamischer Systeme". Begleitend zur Quantendynamik wurde auch die Integration von nichtlinearen Schrödingergleichungen untersucht – mit interessanten Querverbindungen zum Schwerpunkt "Integrierte Optik", dort insbesondere *Optische Netze*, deren Modellierung ebenfalls auf solche Gleichungen führt.

Prozeßsimulation. Die Simulation von zeitabhängigen Prozessen in Chemie- und Verfahrenstechnik ist ein bereits über Jahre laufender Schwerpunkt unserer Arbeit. Im Berichtszeitraum wurde der von uns entwickelte *adaptive Multilevel-FEM-Code* KARDOS in Richtung auf *reaktive Strömungen* ausgebaut, insbesondere für die inkompressible Navier-Stokes-Gleichung (2D) und konvektiv dominante Strömung (3D). Größere Anwendungsprobleme, die wir derzeit im Visier haben, sind einerseits *mittelfristige Klimavorhersagen* (Kooperation R. KLEIN, FU Mathematik und Potsdamer Institut für Klimafolgenforschung) und andererseits die Simulation von *Flugzeugantrieben* im Rahmen des BMBF-Verbundprojektes AMANDA, dessen Planung bereits recht weit fortgeschritten ist, so daß mit einem Beginn noch vor Sommer 98 zu rechnen sein dürfte. Im Rahmen eines von CRAY/SGI geförderten Projektes wurde die Parallelisierung sowohl des FE-Codes KARDOS2D als auch des FD-Codes PDEX1D vorangetrieben. Im gesamten Gebiet der Prozeßsimulation war das abgelaufene Jahr für die Arbeitsgruppe gekennzeichnet durch die Aufnahme von neuen vielversprechenden Arbeitskontakten mit einer Reihe von universitären und industriellen Partnergruppen aus der Chemie- und Verfahrenstechnik.

Hochfrequente Elektrotechnik. Auch dieser Schwerpunkt wird vom ZIB seit Jahren gepflegt, insbesondere innerhalb des Sonderforschungsbereiches "Hyperthermie: Methodik und Klinik" sowie in einem BMBF-Projekt zur *Integrierten Optik*. Der bereits im Vorjahr in ersten Anfängen beschriebene neue Mehrgitter-Algorithmus für die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen wurde im Berichtszeitraum noch wesentlich verbessert durch Hinzunahme eines hybriden Glätters sowie zweier a-posteriori Fehlerschätzer, womit volle Gitteradaptivität ermöglicht wurde. Ein Teil dieser Arbeiten

erfolgte in enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe HOPPE (FB Mathematik, Universität Augsburg), eine vielversprechende Kooperation mit der Arbeitsgruppe VOGES (FB Elektrotechnik, Universität Dortmund) hat sich angebahnt. Auch im Bereich der Simulation von *verlustbehafteten* Komponenten der integrierten Optik, der ebenfalls im Vorjahr schon erwähnt worden war, haben sich in 1997 eine Reihe signifikanter Verbesserungen bei der Mehrgitterlösung von Eigenwertproblemen der *komplexen Helmholtz-Gleichung* ergeben. Diese Fortschritte führten in Kooperation mit Siemens (München) zu wichtigen Simulationen aktiver integriert-optischer Bauteile (MQW-Laser). Die Entwicklung von *diskreten transparenten Randbedingungen* in 2D konnte 1997 einen Durchbruch erzielen. Wesentliches analytisches Hilfsmittel war hierbei eine geeignete Erweiterung der Laplace-Transformation. Erste numerische Ergebnisse für die Helmholtz-Gleichung sind (in Kap. 2.2.5) bereits dargestellt. Die erfolgreiche theoretische und algorithmische Konstruktion solcher nichtlokaler Randbedingungen in mehr als einer Raumdimension wird Konsequenzen in zahlreichen Anwendungsproblemen nach sich ziehen – der übliche Querschnittscharakter mathematischer Lösungen.

Medizinische Therapieplanung. Dieser seit Jahren erfolgreiche Schwerpunkt hat sich auch 1997 positiv weiterentwickelt. Ein Großteil der Arbeiten geschah im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 273 “Hyperthermie: Methodik und Klinik”, der im Berichtsjahr positiv begutachtet wurde und in seine zweite Phase eintrat. Im Zentrum stand die Weiterentwicklung unseres Therapieplanungssystems HyperPlan für die regionale Hyperthermie zu einem praxistauglichen Werkzeug: nunmehr lassen sich alle Schritte, von der Bildsegmentierung bis hin zur Berechnung optimaler Antennenparameter in wenigen Stunden durchführen – vor drei Jahren war noch etwa eine Woche pro Patient notwendig. Die am ZIB entwickelte Software wird ab 1998 von einem kommerziellen Partner zusammen mit den Behandlungsgeräten vertrieben. Neu untersucht wurden darüber hinaus *nichtlineare* Wärmetransportmodelle, bei denen die Durchblutung (Perfusion) noch mit dem Wärmetransport rückkoppelt, sowie Verfahren zur Geometrie-Rekonstruktion aus Bilddaten, die nun eine zügige Erstellung von individuellen, anatomisch getreueren Gittermodellen aus Tomographie-Daten erlauben. Diese Fragestellung wurde zugleich im Rahmen des in 1997 neu eingerichteten Graduiertenkollegs “Temperaturabhängige Effekte in Therapie und Diagnostik” angegangen. Um den Austausch gerade auch der jüngeren Leute zu fördern, wurde gemeinsam mit dem Heidelberger Graduiertenkolleg “Tumordiagnostik und Therapie” der Workshop SCMED 97, “Scientific Computing in der Medizin”, vom 22.–23. September 1997 am ZIB abgehalten. Die Nachfolgeveranstaltung SCMED 98 soll in London stattfinden.

Virtuelle Labors. Unter diesem Begriff werden integrierte rechnergestützte Arbeitsumgebungen verstanden, die dem Anwender einen nahtlosen Übergang zwischen Bildverarbeitung, geometrischer Modellbildung, numerischer Simulation und maßgeschneiderter Visualisierung erlauben. Ein Prototyp einer solchen Arbeitsumgebung war unser oben genanntes HyperPlan, aus dem sich im Berichtszeitraum in rascher Folge Erweiterungen für recht unterschiedliche Anwendungen entwickelt haben. Im Rahmen

des neu begonnenen BMBF-Verbundprojekts “Virtuelles Gehirn: Visualisierung von 3D-Strukturen und Funktionen” (Sprecher: M. HEISENBERG, FB Biologie, Universität Würzburg) zur Erforschung von anatomischen und funktionellen Eigenschaften *biologischer neuronaler Systeme* wurde unsere Software als allgemeine Plattform für die weitere Entwicklung eines *virtuellen Neurolabors* ausgewählt (Programmsystem Ginkgo). Im Vordergrund des Interesses standen dabei neue Werkzeuge zur Untersuchung morphologischer Fragen und zur Erstellung von anatomischen Atlanten auf der Basis von Bilddaten der *konfokalen* Mikroskopie. Sobald einmal die 3D-Architektur des Gehirns niedriger Lebewesen (z.B. von Drosophilafliegen) im Rechner hinreichend klar und einfach zugreifbar vorliegen wird, werden geeignete mathematische Modelle zu entwickeln sein, die eine detaillierte Untersuchung der Funktion dieser neuronalen Netzwerke mit Hilfe numerischer Simulationen erlauben sollen. Eine zweite Aktivität in diesem Zusammenhang betraf Vorarbeiten für eine geplantes Projekt *Virtuelles RNA-Labor* innerhalb des geplanten Forschungsverbundes BeRNAT (Berliner RNA-Technologie-Netzwerk, Sprecher: V. ERDMANN, FU Biochemie). Dieses Labor soll den Import von Moleküldaten, die Darstellung von Molekülen und deren Eigenschaften sowie neue Methoden der Simulation molekularer Systeme in einer Software-Umgebung möglichst flexibel und dennoch effizient integrieren – siehe hierzu auch die Schwerpunkte “Wesentliche Moleküldynamik” und “Quanten-klassische Dynamik”. Ziel ist die möglichst weitgehende Verlagerung von zeitraubenden und kostspieligen experimentellen Schritten vom realen chemischen Labor in das virtuelle Labor im Rechner. Gegen Jahresende wurde mit dem Albert-Einstein-Institut für Gravitationsphysik der Max-Planck-Gesellschaft in Potsdam ein Kooperationsvertrag geschlossen: auf wissenschaftlicher Ebene steht die Visualisierung von Daten aus Simulationen von Modellen der *Allgemeinen Relativitätstheorie* (siehe den gleichnamigen Schwerpunkt) im Blickpunkt des Interesses, insbesondere eine geeignete Visualisierung von (vierdimensionalen) Tensorfeldern. In die Zusammenarbeit ist auch das NCSA (Urbana-Champaign, USA) einbezogen. Abschließend sei noch erwähnt, daß im Berichtsjahr zum zweiten Mal die internationale Tagung “Visualization and Mathematics” durchgeführt wurde (gemeinsam mit K. POLTHIER, Sfb 288 “Geometrie und Quantenphysik”, TU Berlin).

Der Bereich **Diskrete Methoden** bestand bis Ende 1997 aus den Abteilungen *Optimierung*, *Wissenschaftliche Informationssysteme* und *Symbolik*. Nicht zuletzt wegen des Ausscheidens des Abteilungsleiters aufgrund eines schweren Verkehrsunfalls ist mit Beginn des Jahres 1998 die Abteilung Symbolik in die beiden anderen Abteilungen integriert worden. Die Forschungsaktivitäten des Bereichs Diskrete Methoden reichen von der Grundlagenforschung in den Gebieten Diskrete Geometrie und Geometrie der Zahlen über methodische Forschung in den Bereichen der linearen, nichtlinearen, (gemischt-) ganzzahligen und stochastischen Optimierung bis hin zu Anwendungsprojekten aus den Bereichen Telekommunikation, Kraftwerkssysteme und Transportwesen. Wie auch in den Vorjahren hat sich das enge Zusammenwirken von Theorie und Praxis als ein erfolgreiches Konzept erwiesen. Dies dokumentiert sich u.a. in der um-

fangreichen Drittmittelförderung von Seiten des Senats von Berlin, des DAAD, der DFG, des BMBF und zahlreicher industrieller Partner.

Die inhaltlichen Schwerpunkte im Berichtszeitraum 1997 lassen sich den folgenden Themen zuordnen:

Optimierung

- Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie
- Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme
- Zahlentheoretische und geometrische Methoden
- Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen
- Telekommunikation
- Stochastische Optimierung und Anwendungen

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen.

Die einzelnen Schwerpunkte der Abteilung *Optimierung* werden im folgenden überblicksartig dargestellt. Eine entsprechende Beschreibung der Schwerpunkte der Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* findet sich in Kapitel 3.

Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie. Verfahren basierend auf polyedrischen und graphentheoretischen Methoden gehören zu den effizientesten Algorithmen zur Behandlung diskreter Optimierungsprobleme. Im Berichtszeitraum führten Mitarbeiter des Bereichs u.a. Untersuchungen zu Seitenflächen von Polyedern, perfekten Graphen und kombinatorischen Unterteilungen endlicher Punktfigurationen durch, die sich z.B. im Zusammenhang mit folgenden Fragestellungen ergeben: Partitionierung von Graphen, Netzwerkdesign, Scheduling, Frequenzzuweisung im Mobilfunk, Rucksack- und Rundreiseprobleme. Die dabei erzielten Resultate gehen ein in die Entwicklung von Algorithmen zur Lösung von Anwendungsproblemen aus Projekten mit Kooperationspartnern in Industrie und Wirtschaft. Die Projekte dieses Schwerpunktes werden durch Mittel der DFG gefördert.

Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme. Dieser Schwerpunkt umfaßt die Themen lineare (gemischt-) ganzzahlige und nichtlineare ganzzahlige Optimierung. Im Bereich der linearen (gemischt-) ganzzahligen Programmierung konzentrierten sich die Aktivitäten auf die Entwicklung und Implementierung von Schnittebenenverfahren. Eine wichtige Komponente solcher Verfahren ist die Identifizierung von algorithmisch vorteilhaften Strukturen der Nebenbedingungsmatrix. Spezi-

elles Interesse galt dabei den Fragen, ob eine allgemeine Matrix Blockstruktur aufweist, bzw. wie Blockstruktur methodisch nutzbar gemacht werden kann. In diesem Zusammenhang wurde eine Dekompositionsmethode für Matrizen entwickelt, deren algorithmische Umsetzung zu Verbesserungen bei der Lösung ganzzahliger Programme führte. Zum Teil beachtliche Erfolge konnten bei gemischt ganzzahligen Programmen erzielt werden. Durch die Klassifizierung von gewissen neuen gültigen Ungleichungen wurden deutliche Laufzeitverbesserungen bei praktischen Problemen erreicht. Im Bereich der nichtlinearen Ansätze zur Behandlung diskreter Probleme ermöglichte die Entwicklung des spektralen Bündelverfahrens, eine Spezialisierung des üblichen Bündelverfahrens auf Eigenwertprobleme durch Verwendung eines semidefiniten Schnittebenenmodells, so daß nun semidefinite Relaxierungen großer quadratischer 0/1 Probleme in angemessener Zeit approximativ berechnet werden können. Das Verfahren zur Fixierung von Variablen mittels Analyse der semidefiniten Dualmatrix stellt einen weiteren wichtigen Schritt zur Nutzbarmachung semidefiniter Methoden für die Lösung quadratischer 0/1 Probleme dar. Die Projekte werden durch Mittel der DFG und des DAAD unterstützt.

Zahlentheoretische und geometrische Methoden. Ganzzahlige Optimierung ist eng verbunden mit Fragestellungen aus den Gebieten Geometrie der Zahlen, Algebra, Zahlentheorie und Konvexgeometrie. Das verbindende Element dabei ist das Studium von diskreten Strukturen (Gitter) im Zusammenhang mit kontinuierlichen Mengen (Polytope, Kegel). In diesem durch Mittel der DFG unterstützten Grundlagenprojekt werden neue Resultate und Verfahren für die ganzzahlige Optimierung mit Hilfe der oben angeführten mathematischen Disziplinen abgeleitet bzw. entwickelt. Besonderes Interesse galt im Berichtszeitraum den Projekten Minimale Erzeugendensysteme von Kegeln, Testmengen und der Packung und Überdeckung konvexer Körper. Mitarbeitern des Bereichs gelang es, neue Charakterisierungen von minimalen Erzeugendensystemen anzugeben, die insbesondere die enge Verflechtung zwischen diesen Strukturen und Problemen aus den Bereichen der simultanen Diophantischen Approximation sowie der Desingularisierung von torischen Varietäten aufzeigen. Aus praktischer Sicht vielversprechend sind die Verbindungen zu Testmengen ganzzahliger Programme, mit deren Hilfe exakte primale Optimierungsverfahren für diskrete Probleme konzipiert werden können. Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse bilden einen ersten und erfolgversprechenden Schritt in diese Richtung.

Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen. Fragen der Lösung von Transportproblemen stellen sich heutzutage mit großer Brisanz. In diesem Projekt verfolgen wir das Ziel, komplexe reale Transportprobleme zu modellieren, zu simulieren und mathematische Verfahren zu ihrer Lösung zu entwickeln. Dabei unterscheiden wir zwischen Aufgaben, bei denen zum Entscheidungszeitpunkt sämtliche Daten vorliegen (Off-Line) und Aufgaben, bei denen unvorhersehbare Änderungen der Daten zur ständigen Reoptimierung in Echtzeit zwingen (On-Line). Im Off-Line Bereich arbeiten wir an Problemen der operativen Planung im Öffentlichen Personen-Nahverkehr

(ÖPNV), der Fahrzeugumlaufplanung und der darauffolgenden Dienstplanung, sowie an der ergänzenden Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport. Im On-Line Bereich befassen wir uns in mehreren Projekten mit dem Problem der Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme in flexiblen Fertigungssystemen. Mathematische Grundlagen bilden dabei LP- und Lagrange-Techniken in Multi-Commodity-Flow-Modellen, Set-Partitioning-Ansätze und On-line Varianten des Asymmetrischen Travelling-Salesman-Problems. Die Projekte dieses Themenkreises werden von der DFG, dem BMBF und der Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur gefördert. Kooperationen bestehen mit den Firmen HanseCom GmbH (Hamburg), IVU GmbH (Berlin), Herlitz AG (Berlin), Intranetz GmbH (Berlin) und dem Berliner Zentralausschuß für Soziale Aufgaben e.V.

Telekommunikation. Nach geeigneter mathematischer Modellierung lassen sich Fragen der effektiven Nutzung von Ressourcen in der Telekommunikation mit Methoden der ganzzahligen Optimierung und der Bedientheorie behandeln. Am ZIB bearbeitete Projekte betreffen die Netzwerkdimensionierung, die Frequenzplanung sowie die Dimensionierung von Call Centern und Automatic-Cell-Distribution-Systemen. Dabei kommen primale Heuristiken, Schnittebenenverfahren, Approximationen relevanter Wahrscheinlichkeiten und Momente in Bediensystemen zum Einsatz. Die Projekte zur Telekommunikation werden unterstützt von BOSCH-Telekom GmbH (Backnang), DFN – Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin), E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), Siemens AG (München).

Stochastische Optimierung und Anwendungen. Lösungen von Optimierungsproblemen mit unsicheren bzw. zufallsbehafteten Daten sind von wachsender Bedeutung für die Praxis. In einem Projekt dieses Schwerpunktes arbeiten wir an praxistauglichen Modellen, Algorithmen und Implementierungen zur Festlegung brennstoffkostenminimaler Fahrpläne von Kraftwerkssystemen. Die Modelle unterscheiden sich nach der Länge der zugrundeliegenden Planungshorizonte und der zu Planungsbeginn vorliegenden Information über wirtschaftliche und technische Randbedingungen. Große gemischt-ganzzahlige lineare Programme mit vielfältiger interner Verkopplung sind dabei von besonderer Bedeutung. Algorithmen zur Lösung dieser Probleme nutzen Resultate aus methodischen Forschungsprojekten des ZIB, wie z.B. zur Dekomposition strukturierter gemischt-ganzzahliger LPs. In Kooperation mit der BMW Rolls-Royce GmbH werden in einem weiteren Projekt mathematische Modelle und Algorithmen zur Berechnung der Zuverlässigkeit von technischen Systemen, wie z.B. Flugzeugturbinen, untersucht. Die Projekte dieses Themenkreises werden von der DFG, dem BMBF, der VEAG (Berlin) und der BMW Rolls-Royce GmbH (Berlin) gefördert.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Wesentliche Moleküldynamik

Im Vordergrund dieses Themas stand im Berichtszeitraum die Berechnung wesentlicher Eigenschaften in der Moleküldynamik. Zwei typische Linien wurden verfolgt: die Elimination schneller Freiheitsgrade sowie die direkte Berechnung statistischer Eigenschaften.

Elimination schneller Freiheitsgrade

Bearbeitet von: Folkmar A. Bornemann, Sebastian Reich, Christof Schütte

Kooperationspartner: H. Rabitz (Department of Chemistry, Princeton University, USA), B. Space (Department of Chemistry and Biochemistry, Duquesne University, USA)

Die Beschreibung der Dynamik von Makromolekülen durch Modelle der klassischen Mechanik führt auf *Mehrskal*en-Probleme, bei welchen die schnellen Mikroskalen *nichtlinear* mit den langsamen Makroskalen verkoppelt sind. Aufgrund dieser Koppelung ist die Mikroskala für die langsame Dynamik *effektiv* von großer Bedeutung, d.h. sie kann nicht trivial ausgemittelt oder –gefiltert werden. Auf der anderen Seite ist der Anwender oft nicht an den Details der Mikroskala interessiert, diese sind nicht meßbar und daher „irrelevant“. Zudem möchte man die direkte numerische Simulation der Mikroskala aus Aufwands- und Genauigkeitsgründen unbedingt vermeiden.

Im Berichtszeitraum wurde die im vorangegangenen Jahr entwickelte Methode der *Homogenisierung in der Zeit* [1] zur nichttrivialen Elimination schneller Skalen von der einrequenten auf die mehrfrequente Situation unter der besonderen Berücksichtigung von Resonanzen erweitert. Die Schwierigkeit des mehrfrequenten Falles, nämlich der Nachweis einer komponentenweisen Äquipartitionierung kinetischer und potentieller Energie der schnellen Fluktuationen, konnte indirekt mit der Methode der schwachen Konvergenz bewältigt werden—ohne einen expliziten Ansatz für langsam modulierte harmonische Schwingungen mitführen zu müssen. Dieser *schwache Virialsatz* erlaubt, mit geringem kalkulatorischem Aufwand auch geometrisch komplizierte Situationen zu behandeln. Ein weitreichendes Resultat schwacher Stetigkeit *trilinear*er Ausdrücke fast harmonischer Schwingungen führte zur *adiabatischen Invarianz* der zur schnellen Fluktuation gehörigen komponentenweisen *Wirkungsvariablen*. Diese Technik der *adiabatischen Elimination schneller Skalen* liefert schließlich ein der quantenmechanischen Born–Oppenheimer–Approximation analoges Grenzmodell, welches Grundlage tiefergehenden Modellverständnisses sowie effizienter numerischer Verfahren werden kann. Die Methodik wurde in einer umfassenden Monographie [2] vorgestellt, in welcher unter anderem eine vielversprechende Anwendung auf das Butanmolekül diskutiert wird. Die Analogie zur Quantenmechanik führte zum Einsatz der Methode bei der Diskussion von QCMD–Modellen, siehe (2.2.2).

Kürzlich wurde die Methode der Homogenisierung in der Zeit auf Systeme mit viskoser Reibung oder gyroskopischen Kräften verallgemeinert [3], was ihr Anwendungsfeld beträchtlich erweitert.

Ein anderer Zugang zur Untersuchung schneller Mikroskalen besteht in der Anwendung der *Mittelungsmethode* oder *Normalformtheorie*. Dies setzt voraus, daß eine geeignete Umformulierung des Problems gefunden werden kann, welche die Anwendung einer Normalformrekursion erlaubt. In der Arbeit [9] wurde dies für allgemeine konservative mechanische Systeme mit einem schnellen Freiheitsgrad und für konservative mechanische Systeme, deren schnelle Freiheitsgrade konstante Frequenz haben, ausgeführt. Die Grundidee besteht in der Einführung einer symplektischen Struktur des Phasenraumes, welche man nicht in der üblichen Darbouxschen Form schreibt, und in der Ableitung einer zugehörigen Normalformrekursion.

Ein wesentlicher Bestandteil der Normalformtheorie ist die Abschätzung des Abbruchfehlers in der Normalformrekursion. Unter geeigneten Voraussetzungen an das Problem läßt sich dieser Fehler exponentiell klein halten. Dies erlaubt Aussagen über den Gültigkeitsbereich der adiabatischen Invarianz der zugehörigen Wirkungsvariablen. In der Arbeit [9] konnte für eine sehr allgemeine Formulierung der Normalformrekursion eine neue Technik zum Beweis dieser Abschätzungen angegeben werden.

Ein weiterer interessanter Aspekt der Normalformtheorie besteht in der Anwendung auf numerische Integrationsverfahren. Dabei geht es um die Erhaltung adiabatischer Invarianten unter numerischer Diskretisierung. Siehe auch Projektschwerpunkt 2.2.9 "Invarianzeigenschaften dynamischer Systeme".

Direkte Berechnung chemischer Konformationen

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Christof Schütte, Wilhelm Huisinga, Alexander Fischer

Kooperationspartner: M. Dellnitz, O. Junge (Universität Bayreuth), G. Keller (Universität Erlangen)

Ende 1996 war der Entwurf eines völlig neuen Algorithmus zur Berechnung der Statistik von (globalen) Konformationsänderungen molekularer Systeme [4] gelungen. Im Berichtsjahr konnte das zugrundeliegende Konzept wesentlich weiterentwickelt werden, was erstmals die erfolgreiche Anwendung auf kleinere molekulare Systeme (z.B. Pentan) erlaubte. Die neue Methode gestattet direkt, d.h. ohne Langzeit-Simulationen, die Identifizierung metastabiler Konformationen und die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Konformationen.

Der 1996 vorgestellte Algorithmus beruht auf der Formulierung des Problems mit Hilfe des Frobenius–Perron–Operators des Systems, der den Transport von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Phasenraum durch den Fluß der Hamiltonschen Bewegungsgleichung beschreibt. Invariante Maße und invariante Mengen ergeben sich aus Eigenfunktionen des Frobenius–Perron–Operators zum Eigenwert $\lambda = 1$. Metastabile Konformationen des molekularen Systems stehen im Zusammenhang mit Eigenfunktionen

zu Eigenwerten im Inneren des Einheitskreises nahe $\lambda = 1$. Der Frobenius–Perron–Operator und seine Eigenvektoren werden durch Diskretisierung im Ort mittels eines adaptiven multilevel Unterteilungsalgorithmus approximiert.

Im Berichtszeitraum wurde dieses Konzept sorgfältig analysiert. Bei der Anwendung auf realistische molekulare Systeme ergaben sich *zwei* wesentliche Schwierigkeiten: Zum einen ist bei Verwendung deterministischer Verfahren zur Diskretisierung eine kombinatorische Explosion der Komplexität für größere Moleküle nicht zu vermeiden. Zum anderen ergibt sich ein Widerspruch zwischen der analytischen Unitarität des Frobenius–Perron–Operators, betrachtet als Operator auf L^2 , und der Idee, aus Eigenwerten *im* Einheitskreis die Konformationen des Systems zu berechnen. Für den *im Phasenraum diskretisierten* Operator erhält man allerdings Eigenwerte im Inneren des Einheitskreises und physikalisch überzeugende Ergebnisse für Konformationen einfacher Testsysteme [4]. Eine vollständige mathematische Begründung des Algorithmus ist erst nach Konstruktion geeigneter Funktionenräume für den Operator zu erwarten (hierzu wurde eine Kooperation mit G. Keller, Universität Erlangen, angebahnt).

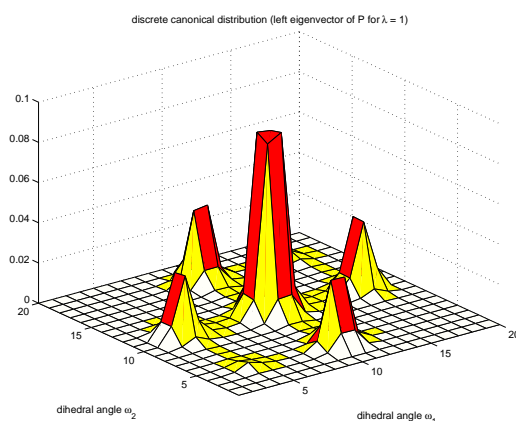


ABBILDUNG 2.1: Stationäre Aufenthaltsdichte (kanonische Verteilung) beim n –Pentan–Molekül, aufgetragen gegen die beiden Torsionswinkel des Moleküls.

In der zweiten Hälfte des Berichtszeitraumes gelang der Arbeitsgruppe eine Änderung dieses algorithmischen Zugangs, mit der sich *beide* genannten Schwierigkeiten simultan umgehen lassen: Das geänderte Konzept beruht auf einer Definition des Begriffs der Konformation im Rahmen der statistischen Mechanik. Diese Definition erlaubt, den Frobenius–Perron–Operator durch einen anderen Markov–Operator zu ersetzen, der ebenfalls die Umverteilung von Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Ortsraum durch den Fluß der Hamiltonschen Bewegungsgleichung beschreibt. Dieser Operator ist nun selbstadjungiert und besitzt Eigenwerte *im* Einheitskreis [10]. Außerdem erlaubt die spezielle Form des Operators eine Galerkin–Diskretisierung durch Monte-Carlo–Verfahren, welche die kombinatorische Explosion der Komplexität umgehen. Unter diesen Verfahren sind vor allem sogenannte Hybride-Monte-Carlo–Verfahren interes-

sant, welche die Berechnung der Diskretisierung durch Ensembles *kurzer* Teiltrajektorien gestatten [7, 6]. Die Diskretisierung des Markov-Operators liefert eine stochastische Matrix; die Berechnung von Konformationen konnte in sehr allgemeiner Weise auf die Identifizierung fast-invarianter Aggregate der zugehörigen nahezu entkoppelten Markov-Kette zurückgeführt werden [5]. Gegen Ende des Berichtszeitraums konnte dieses neue algorithmische Konzept erstmals mit großem Erfolg auf kleinere molekulare Systeme (z.B. Pentan) angewandt werden [10].

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Simulationspaket für biologische Makromoleküle (Frank Cordes)

Die Anwendung der oben vorgestellten Methoden auf die Konformationsanalyse biologischer Makromoleküle erfordert deren Einbindung in ein Simulationspaket, welches die für biochemische Problemstellungen charakteristischen Anfangs- und Randbedingungen bereitstellt sowie ein schnelles Laufzeitverhalten aufweist. Ein einfacher Moleküleditor wurde implementiert, der es gestattet, auf Basis des semiempirischen GROMOS96-Kraftfelds Startkonformationen für die Simulation von Oligosacchariden, -peptiden und -nukleotiden zu generieren. Theoretische Strukturanalysen solcher Makromoleküle erfordern das schnelle Abtasten des hochdimensionalen Phasenraums. Hierfür wurde die Hybride Monte-Carlo-Methode (HMC-Methode) gewählt. Da das biochemische Verhalten von Makromolekülen entscheidend von der Berücksichtigung der Polarisierung und Ionenstärke des Lösungsmittels abhängig ist, wurde die in FORTRAN90 implementierte HMC-Methode mit der Option versehen, diese Moleküle mit explizit modellierten Wassermolekülen zu umgeben, die in der MD-Simulation als starre Körper behandelt werden [8]. Die Erstellung der Simulationsprogramme erfolgte unter gleichzeitiger Anbindung der Datenstrukturen an das Programm HyperPlan, das zur Visualisierung von Molekültopologien, -strukturen, und Simulationsdaten ausgebaut wird.

Hybride Monte-Carlo-Methoden (Alexander Fischer, Frank Cordes)

Die mathematische Struktur der HMC-Methode wurde in [6] dargestellt und ihre Eigenschaften wurden durch Simulationen an kleinen Molekülen wie Butan und Hexan überprüft. Ausgehend von Atomkoordinaten und zufallsgenerierten Atomimpulsen wird in HMC über kurze Simulationen der Molekulardynamik (MD) eine Markov-Kette realisiert, aus der sich Erwartungswerte von Zustandsgrößen mit einer statistisch garantierten Konvergenz ermitteln lassen. Der hohe Aufwand in der Berechnung einzelner Update-Vorschläge kann aufgrund einer hohen Akzeptanzrate in Kauf genommen werden, sofern der diskrete Phasenfluß der MD neben den notwendigen Bedingungen der Reversibilität und Volumenerhaltung auch eine möglichst gute Energieerhaltung gewährleistet. Insbesondere wurden in dieser Arbeit Reweighting-Techniken entwickelt, mit denen durch Simulationen in sogenannten gemischt-kanonischen Gesamtheiten Energiebarrieren leichter überwunden werden, um so dem für biologische Makromoleküle charakteristischen Problem der Metastabilität entgegenzuwirken. Die Be-

deutung des Reweightings ließ sich eindrucksvoll an der theoretischen Konformationsanalyse von RNA demonstrieren [7], bei der herkömmliche Monte-Carlo-Methoden versagen.

Publikationen

- [1] F.A. Bornemann and Ch. Schütte, *Homogenization of Hamiltonian systems with a strong constraining potential*, Physica D, 102 (1997), pp. 57–77.
- [2] F.A. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Conservative Mechanical Systems*, Habilitationsschrift, Freie Universität Berlin, 1997, Preprint SC 97–48, ZIB, 1997.
- [3] F.A. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems II: Subject to Friction or Gyroscopic Forces*, Preprint SC 97–65, ZIB, 1997.
- [4] P. Deuffhard, M. Dellnitz, O. Junge, Ch. Schütte, *Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques*. Erscheint in: P. Deuffhard, J. Hermans et al. (Eds.), “Algorithms for Macromolecular Modelling.” Springer-Verlag (1998).
Erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup/>.
- [5] P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, Ch. Schütte, *Identification of Almost Invariant Aggregates in Nearly Uncoupled Markov Chains*, Preprint SC 98–03, ZIB, 1998.
- [6] A. Fischer, F. Cordes, Ch. Schütte, *Hybrid Monte Carlo with Adaptive Temperature in a Mixed-Canonical Ensemble: Efficient Conformational Analysis of RNA*, Preprint SC 97–67, ZIB, 1997.
- [7] A. Fischer, *Die Hybride Monte-Carlo-Methode in der Molekülphysik*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 1997.
- [8] T. Holder, *Strukturerhaltende Integration Hamiltonscher Systeme unter besonderer Berücksichtigung der Dynamik starrer Körper*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 1997.
- [9] S. Reich, *Dynamical Systems, Numerical Integration, and Exponentially Small Estimates*, Habilitationsschrift (eingereicht), Freie Universität Berlin, 1997.
- [10] Ch. Schütte, A. Fischer, W. Huisinga, P. Deuffhard, *A Hybrid Monte Carlo Method for Essential Molecular Dynamics*, Preprint SC 98–04, ZIB, 1998.

2.2.2 Quanten–klassische Dynamik

Dieser Projektschwerpunkt greift die in nahezu allen Bereichen der Molekülphysik gemachten Beobachtungen auf, daß viele interessante Eigenschaften von Molekülen erst bei Berücksichtigung *quantendynamischer* Prozesse korrekt beschrieben und beeinflusst werden können (z.B. Bindungsdynamik, photoinduzierte Prozesse). Dem steht gegenüber, daß eine *vollständig* quantenmechanische Simulation der Dynamik größerer Moleküle aus Aufwandsgründen jenseits des Rechenbaren liegt (auch in absehbarer Zukunft). Daher sucht man nach sogenannten *gemischt quanten–klassischen* Modellen, welche die Einbindung quantendynamischer Prozesse in eine klassische Beschreibung des größten Teils des molekularen Systems erlauben. Dabei ist vor allem die Beschreibung der sogenannten *nicht–adiabatischen* Kopplungen der hochfrequenten quantendynamischen Dynamik an die langsamen “klassischen” Bewegungen entscheidend. Aber gerade die verlässliche Modellierung dieser Effekte stellt ein weitgehend nicht gelöstes Problem dar. Der Projektschwerpunkt hat die Entwicklung neuer quanten–klassischer Modelle und passender Algorithmen zur Beschreibung nicht-adiabatischer Prozesse zum Ziel. Im Berichtszeitraum konzentrierte sich die Arbeit auf das Studium und die Erweiterung des sogenannten quanten–klassischen Moleküldynamik–Modells (QCMD). Das Versagen dieses Modells in gewissen nicht–adiabatischen Situationen wurde studiert und eine erste wesentlich verbesserte Variante vorgeschlagen. Gleichzeitig wurde eine neue Klasse von Algorithmen vorgestellt, die eine effiziente numerische Umsetzung dieser Modelle gestatten. Zum Zweck einer verbesserten Vergleichbarkeit der verschiedenen Algorithmen und Modelle wurde eine umfangreiche Programmbibliothek erstellt.

Adiabatischer Grenzfall und nichtadiabatische Eigenschaften von QCMD

Bearbeitet von: Christof Schütte, Folkmar A. Bornemann, Peter Nettesheim

Kooperationspartner: B. Schmidt (Freie Universität Berlin, Institut für Physikalische Chemie)

Im QCMD–Modell sind die quantendynamisch beschriebenen Freiheitsgrade (Elektronen oder Protonen mit “kleiner” Masse m) an die klassische, Newtonsche Bewegungsgleichung der Atome/Kerne des Moleküls (mit “großer” Masse M) gekoppelt. Der *adiabatische Grenzfall* ist gegeben, wenn die schnellen quantendynamischen Freiheitsgrade instantan der Bewegung der Atome folgen, also im singulären Limes $\epsilon = m/M \rightarrow 0$. Um zu verstehen, wie sich QCMD in nicht–adiabatischen Situationen verhält, sollte man zuerst den adiabatischen Grenzfall von QCMD kennen.

Es stellte sich heraus, daß die Bestimmung der entsprechenden Grenzgleichung der QCMD–Gleichungen mit den im Projekt “Elimination schneller Freiheitsgrade” vorgestellten Techniken der *Homogenisierung in der Zeit* (s. Seite 13) elegant möglich ist. Als Grenzgleichung für $\epsilon \rightarrow 0$ ergibt sich eine Variante der bekannten Gleichung des zeitabhängigen Born–Oppenheimer–Modells [1, 2]. Außerdem erlaubt dieser Zugang eine genaue Charakterisierung der Resonanzsituationen, an denen die Konver-

genz der QCMD-Lösung zur adiabatischen Grenzlösung zusammenbricht (nichtglatte Kreuzungen von Energieniveaus, z.B. “conical intersection”). Nach dem Durchgang durch solche Resonanzstellen ergibt sich eine kontinuierliche Menge von möglichen Grenzlösungen (ein “Trichter”, s. Fig. 2.2), eine Nicht-Eindeutigkeit, die bisher nur für klassische Systeme bekannt war und dort mit TAKENS-Chaos bezeichnet wird. Interessanterweise endet auch die Approximationskraft des Born-Oppenheimer-Modells an solchen Resonanzstellen. Der Grund dafür ist, daß das beschriebene System dort eine auch im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ sichtbare nicht-adiabatische Anregung erfährt, die bei voll quantendynamischer Beschreibung des Systems zu einer Aufspaltung des Wellenpakets führt (s. Abb. 2.2).

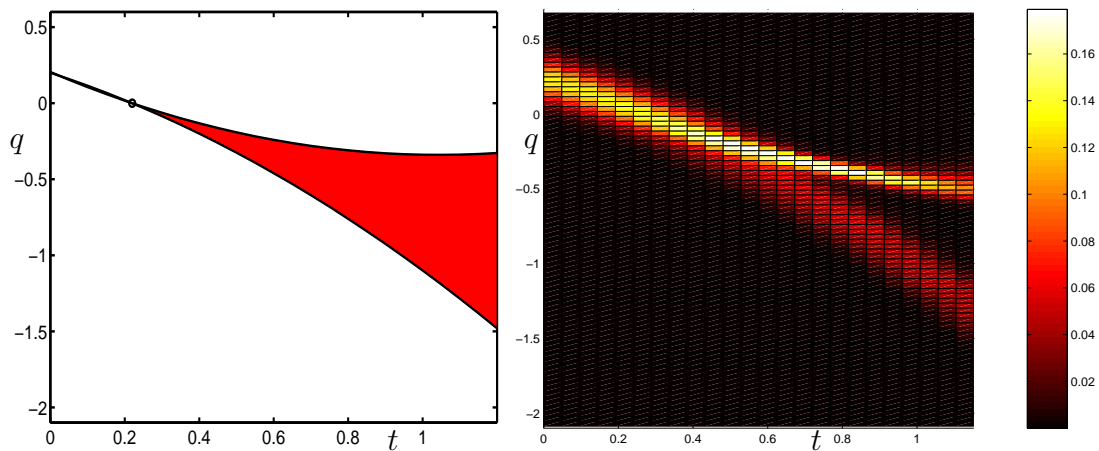


ABBILDUNG 2.2: QCMD und volle Quantendynamik an einem Beispielsystem. Links: Die Nicht-Eindeutigkeitsmenge der QCMD-Grenzlösungen (Resonanzstelle in $t=0.21$). Rechts: Die Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der vollen Quantendynamik. (Vgl. [7])

Untersuchungen an einem generischen Testsystem ergaben, daß das Wellenpaket dabei genau den Trichter der QCMD-Grenzlösungen überspannt, d.h. in der voll quantendynamischen Beschreibung tritt der QCMD-Trichter wieder auf, diesmal als Ausbreitungsbereich der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Uns gelang die Entwicklung einer auf Trajektorienbündeln basierenden QCMD-Version, welche die Reproduktion der voll quantendynamischen Wahrscheinlichkeitsverteilung im Trichter gestattet, d.h. die nicht-adiabatische Anregung korrekt zu beschreiben erlaubt [7]. Kürzlich konnte dieses neue quantenklassische Modell auch auf grundsätzlich andere Klassen nicht-adiabatischer Effekte (“avoided crossing”) übertragen werden.

Effiziente Integratoren für QCMD

Bearbeitet von: Peter Nettesheim, Christof Schütte, Martin Holz, Sebastian Reich

Kooperationspartner: Ch. Lubich, M. Hochbruck (Universität Tübingen, Fachbereich Mathematik)

Die seit 1995 ständig verfeinerte Analyse des QCMD-Modells erlaubt uns mittlerweile auch eine genaue Klassifikation der *algorithmischen* Anforderungen bei verschiedenen Anwendungen in Physik und Chemie. Entsprechend dieser Klassifikation lassen sich die vorgeschlagenen Integratoren in drei Klassen einteilen [6].

Bei *Langzeitsimulationen* sollten zur Verhinderung sich aufschaukelnder Integrationsfehler Verfahren angewandt werden, welche die symplektische Struktur der Gleichungen auf die Lösung vererben. Dazu erarbeiteten wir neben dem schon im letzten Berichtszeitraum vorgeschlagenen PICKABACK-Algorithmus noch verschiedene symplektische *multiple-time-stepping* Methoden [5]. Diese erlauben die Verringerung der Anzahl der Auswertung der klassischen Kräfte durch eine geeignete *strukturehaltende* Aufspaltung der Zeitpropagation in klassische und quantenmechanische Teilschritte. Bei Simulationen über *relativ kurze Zeitintervalle* (einige hundert Femtosekunden) kann man dagegen verstärkt auf die Vorteile von Schrittweitensteuerungen und iterativen Approximationsmethoden der Zeitpropagatoren zurückgreifen [6]. Für Fälle mit eventuell *nicht-adiabatischer* Dynamik mit relativ wenigen besetzten quantenmechanischen Zuständen erarbeiteten wir eine Klasse schrittweitengesteuerter Algorithmen, die auf dem symmetrischen Verlet-Algorithmus sowie z.B. auf einer fehlergesteuerten Lanczos-Iteration zur Propagation des quantenmechanischen Subsystems beruhen. Liegt dagegen eine *fast-adiabatische* Dynamik vor, empfehlen wir einen unterraumorientierten Ansatz, welcher mittels eines Rayleigh-Ritz oder eines Multigrid-Verfahrens den für die quantenmechanische Propagation relevanten Teilraum "optimal" bestimmt [3, 6].

Zur Verdeutlichung der unterschiedlichen Anwendungsgebiete und gleichermaßen der vielfältigen Algorithmen wurde ein objektorientiertes Programm-Paket in der Programmiersprache MATLAB geschaffen (siehe Abb.2.3). Hiermit lassen sich problemlos neue Algorithmen und Anwendungsprobleme implementieren und testen. Besonders hervorzuheben ist dabei die in diesem Gebiet einzigartige Möglichkeit, strukturiert verlässliche Vergleiche über Modellierungsfehler und numerische Approximationsfehler zu gewinnen. Das umfangreich dokumentierte Programm-Paket¹ wird Anfang 1998 im Internet zugänglich gemacht.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Im Zentrum der weiteren Tätigkeit der Arbeitsgruppe stand die Vorbereitung der Anwendung der entwickelten quanten-klassischen Modelle und Verfahren auf realistische makromolekulare Systeme (RNA-Systeme, Edelgas-Cluster). Neben programmtech-

¹<http://www.zib.de/MDGroup>

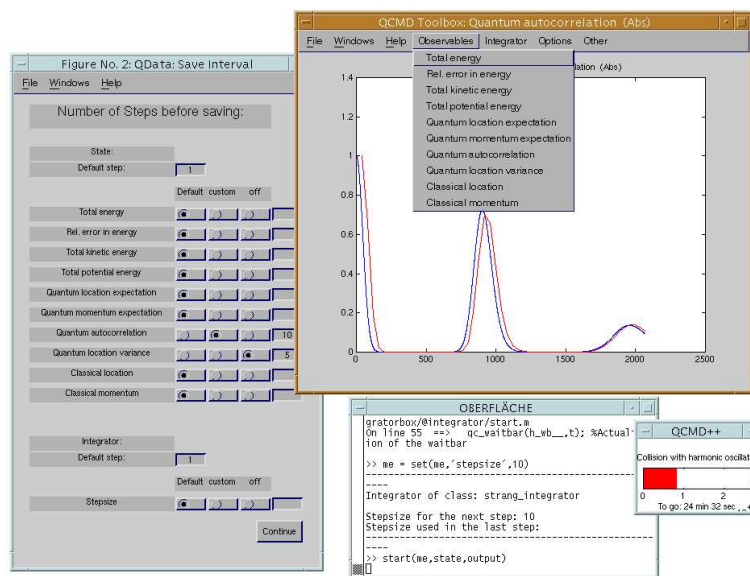


ABBILDUNG 2.3: Benutzeroberfläche des Programm-Paketes zur quanten-klassischen Moleküldynamik. Der modulare Aufbau erlaubt eine einfache Implementation von Modellen der Quanten-Klassik sowie von numerischen Lösungsalgorithmen. Im Vordergrund stehen dabei Vergleichstests zwischen Integratoren bzw. Modellen an übersichtlichen, aussagekräftigen Beispielproblemen.

nischen Vorbereitungen stand die Weiterentwicklung der Integratoren für die rein quantenmechanisch beschriebenen Teilsysteme im Vordergrund.

Orts- und zeitadaptive Numerik der Schrödingergleichung (Lin Zschiedrich, Susanna Gebauer, Frank Schmidt, Christof Schütte, Peter Deuffhard)

Zur Berücksichtigung quantenmechanischer Effekte muß für einige Freiheitsgrade eine *zeitabhängige Schrödingergleichung* gelöst werden. In der Anwendung haben sich Integratoren mit Ortsdiskretisierung durch Spektralmethoden durchgesetzt. Die heute verwendeten Verfahren haben im wesentlichen zwei Nachteile: sie enthalten keinerlei Fehlersteuerung (weder im Ort noch in der Zeit) und sind beschränkt auf uniforme Tensorgitter, die mit zunehmender Dimension eine exponentiell wachsende Anzahl von Freiheitsgraden erzwingen. Im Rahmen einiger Diplomarbeiten haben wir erste Schritte in Richtung auf einen in Ort und Zeit adaptiven Integrator für die zeitabhängige Schrödingergleichung gemacht (Fehlerkontrolle für Spektralmethoden [8], Mehrgittermethode bei impliziter Diskretisierung in der Zeit). Als Kernproblem stellte sich die Gewährleistung des korrekten Transports hoher Frequenzen im Wechselspiel zwischen Orts- und Zeitdiskretisierung heraus.

Numerik der dissipativen Quantendynamik (Wilhelm Huisinga)

Auch für die Integration der dissipativen Quantendynamik (Anbindung quantenmechanischer Freiheitsgrade an ein Wärmebad) konnten algorithmische Fortschritte erzielt werden [4]. Ausgehend von den dort gewonnenen strukturellen Einsichten in die untersuchten numerischen Verfahren wurden insbesondere zur Faber–Approximation Verbesserungsvorschläge entwickelt. Diese betreffen den wichtigen Punkt der Wahl des Approximationsgebietes, die optimale Skalierung des Liouville–Operators sowie die Schätzung des lokalen Fehlers.

Publikationen

- [1] F.A. Bornemann and Ch. Schütte, *On the Singular Limit of the Quantum-Classical Molecular Dynamics Model*, Preprint SC 97–07, ZIB, 1997.
- [2] F.A. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Conservative Mechanical Systems*, Habilitationsschrift, Freie Universität Berlin, 1997, Preprint SC 97–48, ZIB, 1997.
- [3] B. Dietrich, *Numerische Behandlung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit iterativen Unterraummethode*n, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 1997.
- [4] W.Huisinga, *Faber-, Newton- und Krylov-Approximation zur Integration großer Differentialgleichungssysteme aus der Quantenmechanik*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 1997.
- [5] P. Nettesheim and S. Reich, *Symplectic Multiple-Time-Stepping Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*, Preprint SC 97–56, ZIB, 1997.
- [6] P. Nettesheim and Ch. Schütte, *Numerical Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*, Preprint SC 97–42, ZIB, 1997.
- [7] Ch. Schütte and F.A. Bornemann, *Approximation Properties and Limits of the Quantum-Classical Molecular Dynamics Model*, Preprint SC 97–41, ZIB, 1997.
- [8] J. Willkomm, *Eine adaptive Dimensionssteuerung der Ortsdiskretisierung der Schrödingergleichung*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 1997.

2.2.3 Adaptive Multilevel-FEM

In diesem seit vielen Jahren laufenden Schwerpunkt stand im Berichtszeitraum die Weiterentwicklung adaptiver Multilevel–FE–Methoden für zeitabhängige Probleme im Vordergrund. Von zentraler Bedeutung war dabei die Erweiterung der Methoden zur Simulation reaktions–diffusions–dominanter Probleme in Richtung auf Probleme, in denen Strömungseffekte dominieren.

KARDOS3D für konvektions–dominante Probleme

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch

Im Mittelpunkt des Projektes stand die Erweiterung des Programmpaketes KARDOS3D auf nichtlineare Evolutionsprobleme mit dominierender Konvektion. Dabei konnte auf zahlreiche algorithmische Vorarbeiten und Erfahrungen bei der Simulation von 2D–Problemen zurückgegriffen werden (siehe Projekt ”KARDOS2D für inkompressible Strömungen“). Wesentlich war die Realisierung eines Galerkin/Least–Squares Verfahrens mit adaptiver Gittersteuerung. Damit wird eine flexible Stabilisierung der verwendeten Finiten Elemente erreicht, die auf dem lokalen Verhältnis von Diffusion zu Konvektion beruht. Das Programm kann damit sowohl für diffusions–dominante als auch konvektions–dominante Probleme verwendet werden.

Ein prominentes Modellproblem mit dominierender Konvektion ist die Burgers’ Gleichung, die als Vorstufe für die Navier–Stokes Gleichungen gilt:

$$\begin{aligned} u_t + uu_x + vv_y + ww_z &= \varepsilon \Delta u, \\ v_t + uv_x + vv_y + wv_z &= \varepsilon \Delta v, \\ w_t + uw_x + vw_y + ww_z &= \varepsilon \Delta w. \end{aligned}$$

Der Transportterm ist lösungsabhängig und damit ist das Verhältnis von Diffusion zu Konvektion ortsabhängig. Die Abbildung 2.4 zeigt das Rechengebiet, ein dreidimensionales L–Gebiet mit einem würfelförmigen Loch in der Mitte (links), und einen Schnitt durch die örtliche, angepaßte Diskretisierung für eine Simulation dieses Modellproblems mit $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-3}$ (rechts). Die Lösung ist eine wandernde Wellenfront von rechts unten nach links oben. Eine besondere Schwierigkeit liegt im Passieren des inneren Hindernisses. Um die örtliche Auflösung besser darstellen zu können, wurde das Rechengebiet in der Mitte aufgeschnitten. Die adaptive Anpassung der räumlichen Diskretisierung ist deutlich erkennbar.

KARDOS2D für inkompressible Strömungen

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch

Ziel dieses Projektes ist es, geeignete Diskretisierungsmethoden innerhalb des adaptiven FEM–Paketes KARDOS für die Simulation von inkompressiblen Strömungen bereitzustellen. Um auch Probleme mit hohen Reynolds–Zahlen behandeln zu können, wurden spezielle Stabilisierungstechniken untersucht, die es erlauben, einerseits numerische Instabilitäten bei dominierenden Transport–Termen zu verhindern und andererseits gleiche Ansatzgrade für Geschwindigkeitsfeld und Druck zu benutzen. Die Stabilisierung erfolgt mit Hilfe von Galerkin/Least–Squares–Verfahren, die auf der zusätzlichen Assemblierung von gewichteten Residuen basieren. Die Technik kann für eine stationäre und auch instationäre Strömungsberechnung verwendet werden.

Umfangreiche theoretische Arbeiten waren notwendig, um die Adaptivität in der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung auch für Strömungssimulationen zur

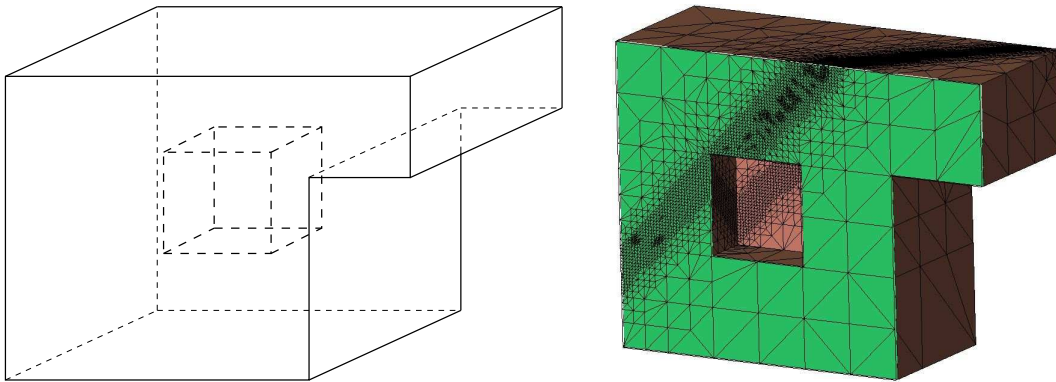


ABBILDUNG 2.4: Wandernde Wellenfront durch ein L-Gebiet mit Loch (Burgers' Gleichung)

Verfügung zu haben. Für die zeitliche Diskretisierung werden linear implizite Methoden mit automatischer Schrittweitensteuerung verwendet. Um Verfeinerungen und Vergrößerungen in der örtlichen Diskretisierung zu realisieren, wurden spezielle Fehlerschätzer auf der Grundlage von lokalen Dirichlet-Problemen entwickelt. Diese Schätzer arbeiten ohne physikalisches Hintergrundwissen und sind daher nicht abhängig von speziellen Problem-Voraussetzungen. Damit gelingt es, verschiedenste Problemstellungen mit ein der derselben Strategie zu bearbeiten.

In einem ersten Schritt wurden die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen betrachtet. Thermische Effekte können über die Boussinesq-Approximation berücksichtigt werden. Als zu lösendes System ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho_0[\partial_t u + (u \cdot \nabla)u] - \mu \nabla^2 u + \nabla p &= \rho_0 g[1 - \beta(T - T_0)] + F_u, \\ \nabla \cdot u &= 0, \\ \rho_0 c_p[\partial_t T + (u \cdot \nabla)T] - \kappa \nabla^2 T &= F_T, \end{aligned}$$

wobei die üblichen Bezeichnungen benutzt werden. Das gesamte Verfahren erweist sich als sehr robust und flexibel. Die Abbildung 2.5 zeigt die Entwicklung des Temperaturfeldes für eine Poiseuille Strömung. Die thermischen Instabilitäten sind gut zu sehen.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Domain Decomposition und CCG (Konstantin Lipnikov, Peter Deuffhard)

Das adaptive Multilevel-Verfahren CCG (cascadic conjugate gradient method) eignet sich nicht für elliptische Probleme bei hinreichend großen Materialsprüngen. Für homogene elliptische Probleme, bei denen der Energiefehler im Vordergrund steht, ist es jedoch das einfachste derzeit mögliche Mehrgitterverfahren – wegen des Verzichts auf Grobgitterkorrekturen. Deswegen wurde im Berichtszeitraum speziell für Probleme

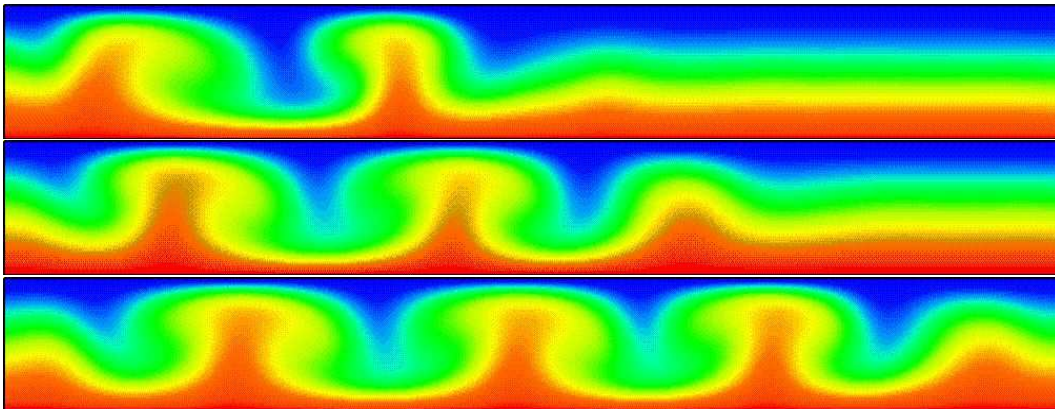


ABBILDUNG 2.5: Zeitliche Veränderung des Temperaturfeldes bei einer thermisch gekoppelten Strömung

mit großen Materialsprüngen eine Kombination von Gebietszerlegungsmethoden, bei denen lokal homogene Teilgebiete vorliegen, mit CCG als MG-Löser auf den Teilgebieten studiert. Um ein Übergreifen von dichten Gittern auf Teilgebieten in die Nachbargebiete zu verhindern, wurden “Mörtel”-Elemente verwendet. Dadurch entstehen Sattelpunktsprobleme auf der diskreten Seite. Deren Lösung mit einer speziellen Variante von CR benötigt jedoch in der derzeitigen Implementierung deutlich mehr Rechenzeit als eine “blauäugige” Anwendung von KASKADE. Erfreulicherweise sind die erzeugten Gitter in der neuen Variante simpler – siehe Abbildung 2.2.3.

Parallelisierung Multilevel FEM (Klaus-Dieter Oertel, Bodo Erdmann, Peter Deuffhard, gefördert von SGI/Cray, München)

Im Projekt “Parallelisierung der KASKADE-Toolbox” wurde ein paralleler Prototyp des am ZIB entwickelten CCG-Algorithmus auf Basis des sequentiellen C++ – Codes, Version 3.1, fertiggestellt. Aus Portabilitätsgründen wurde er auf Basis des MPI (Message Passing Interface) – Standards entwickelt. Damit ist der Code sowohl auf Clustern von Arbeitsplatzrechnern als auch auf der CRAY T3E lauffähig. Die Parallelisierung beruht auf einer nicht überlappenden Gebietszerlegung des adaptiv verfeinerten Gitters und der sich daraus ergebenden Verteilung der relevanten Daten. Für die unterschiedlichen Datenstrukturen zur Beschreibung der geometrischen und algebraischen Informationen wurden entsprechende Kommunikationsstrukturen geschaffen. Alle rechenintensiven Teile der CCG-Variante, wie die Assemblierung und Lösung des linearen Gleichungssystems, die Fehlerschätzung und die Gitterverfeinerung, wurden damit erfolgreich parallelisiert. Die Aufteilung des Gebiets wird lastbalanciert vorgenommen und im Laufe der adaptiven Gitterverfeinerung angepaßt. Zwecks Optimierung der Laufzeit wird die Gebietszerlegung auf der Basis von zu Clustern zusammengefaßten Gitterelementen durchgeführt. Die Cluster werden gemäß hierarchischer Beziehungen im Laufe der adaptiven Verfeinerung bestimmt. Die Parallelisierung von KASKADE

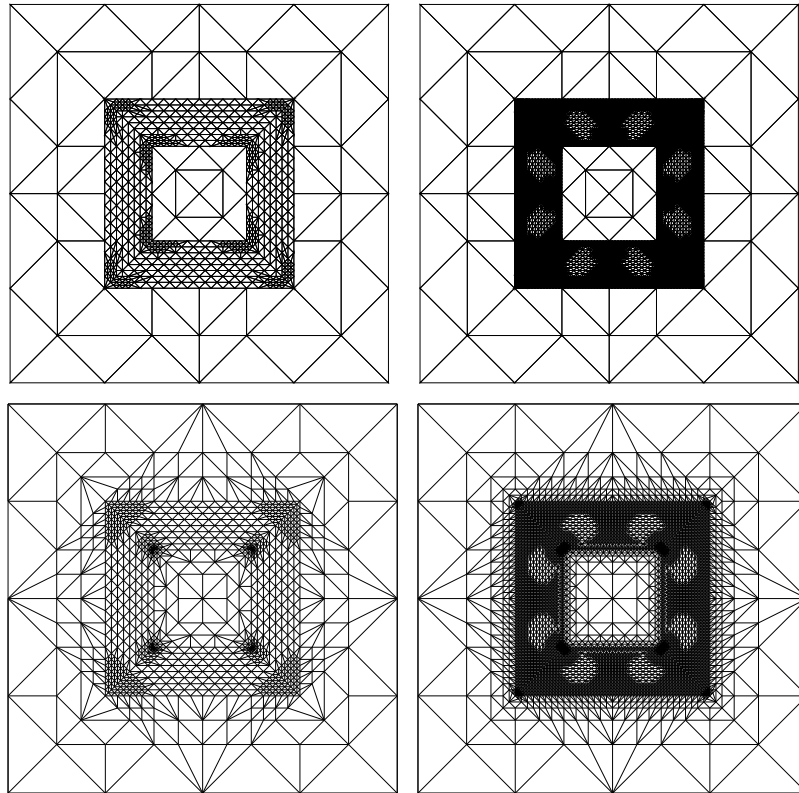


ABBILDUNG 2.6: Adaptive Gitter der Zwei-Term-Gradienten-DD/CCG-Methode (obere Reihe) und der KASKADE/BPX-Methode (untere Reihe)

benutzt die Dynamic-Distributed-Data-Bibliothek (DDD, entwickelt von Klaus Birken, Universität Stuttgart), welche die dynamische Umverteilung von Datenstrukturen in parallelen Programmen unterstützt, insbesondere im Zusammenhang mit adaptiv verfeinerten Gittern.

Es wurde ferner begonnen, die so erprobten Techniken zur Parallelisierung des Programms KARDOS anzuwenden. Dabei tritt als zusätzliche Schwierigkeit die Kontrolle eines zweiten Finite-Elemente-Gitters auf. In einem ersten Schritt wurden parallele Rechnungen für einmalig bestimmte Verteilungen des Startgitters auf die Prozessoren realisiert. Dies erlaubt in Problemen, wo sich die adaptive Verfeinerung in etwa gleichmäßig auf den Prozessoren vollzieht, die Speicheranforderung des Programms entsprechend zu verteilen. Damit können besonders speicherintensive Aufgaben aus dem Bereich der Evolutionsgleichungen überhaupt erst rechenbar gemacht werden. Die Abbildung 2.7 zeigt die Berechnung einer fortschreitenden Flammenfront auf einem und auf vier Prozessoren.

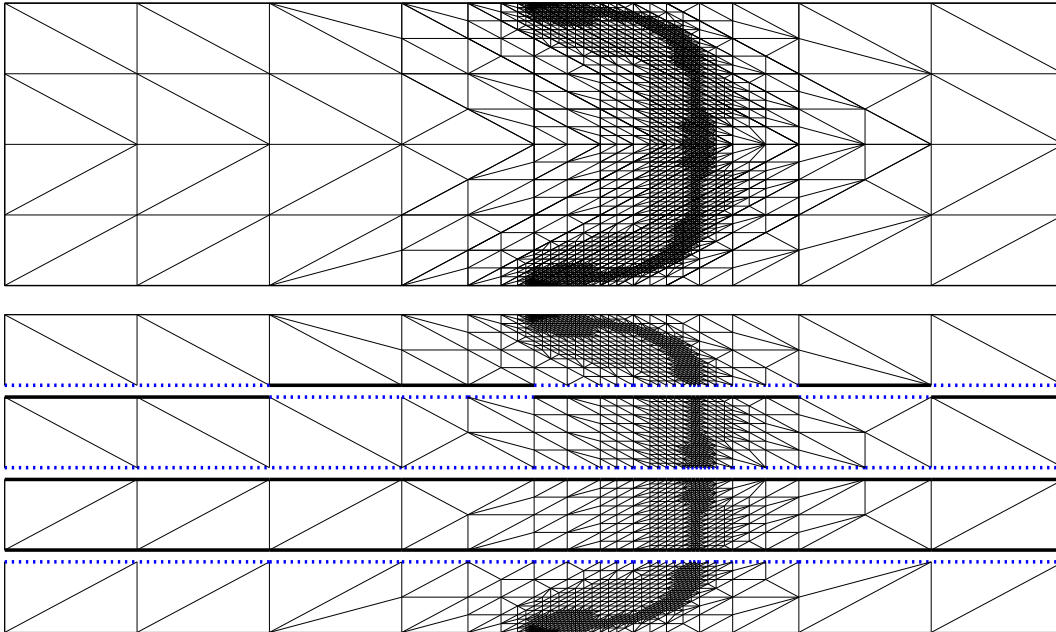


ABBILDUNG 2.7: Festgehaltene Flamme, adaptives Gitter zum Zeitpunkt $t=3.0$, berechnet mit der parallelen KARDOS-Version auf vier Prozessoren.

KASKADE Maintenance (Bodo Erdmann, Jens Lang, Rainer Roitzsch)

Die KASKADE-Versionen 2.1 und 3.1² wurden weiterhin über das Internet verfügbar gemacht. Die Implementierung auf weiteren Rechnern sowie die Anpassung an neue Betriebssystem- bzw. Compiler-Versionen hat die Portabilität der Software deutlich erhöht. Der Austausch mit dem WIAS, Berlin (J. Fuhrmann, H. Langmach), insbesondere zu Gitterverwaltungen, wurde fortgesetzt.

Publikationen

- [1] K. Lipnikov, P. Deuffhard: *Domain Decomposition with Subdomain CCG for Material Jump Elliptic Problems*. Preprint SC 97-36, ZIB, 1997.
- [2] J. Lang, B. Erdmann, R. Roitzsch: *Three-Dimensional Fully Adaptive Solution of Thermo-Diffusive Flame Propagation Problems*. In: R.W. Lewis, J.T. Cross (eds), *Numerical Methods in Thermal Problems*. 857-862, Pineridge Press, Swansea, UK, 1997.
- [3] J. Lang: *Adaptive Incompressible Flow Computations with Linearly Implicit Time Discretization and Stabilized Finite Elements*. Submitted to 4th ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference, Athen '98.

²<ftp://ftp.zib.de/pub/kaskade>

2.2.4 Prozeßsimulation

Im Rahmen dieses Schwerpunktes wird typischerweise die in der Abteilung Wissenschaftliche Software entwickelte numerische Software zur Lösung technologisch relevanter Prozesse eingesetzt. Häufig besitzen die interessanten, schwierigen Anwendungsprobleme besondere Eigenschaften, die eine Simulation mit einem Standardverfahren nicht unmittelbar zulassen oder zu einem nicht effizienten Einsatz der Verfahren führen. Es sind geeignete Modifikationen und Erweiterungen zu entwickeln, um den Anforderungen aus der Praxis gerecht zu werden. Als Ausgangspunkt dient dabei meist eines der Standardverfahren KARDOS-1D/2D, PDEX1M, LIMEX oder NLEQ1. Treten bei der Simulation besondere Schwierigkeiten auf, so kann dies auch Anlaß zur Entwicklung völlig neuer Algorithmen sein. Ein weiterer Aspekt der Arbeit ist die Unterstützung der Anwender bei einer geeigneten Modellierung der zu simulierenden Phänomene.

Extrapolationsverfahren für Aerosolsimulation

Bearbeitet von: Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard, Lars Oeverdieck

Kooperationspartner: J. Körber, K. Schaber (Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Universität Karlsruhe)

Förderung: SGI/Cray, München: "Parallel Linearly–Implicit Extrapolation Methods", Volkswagenstiftung: Simulation von Aerosol–Bildung

Mit Hilfe der im letzten Jahr entwickelten parallelen linear–impliziten Extrapolationsverfahren konnten jetzt schwierige Probleme der Verfahrenstechnik bearbeitet werden. Ein besonderer Schwerpunkt lag hierbei in der Implementierung der parallelen Algorithmen in das Programmpaket SENECA, das Aerosolbildung und –wachstum in verfahrenstechnischen Anlagen simuliert. SENECA ist ein gemeinsames Projekt mit dem Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik der Universität Karlsruhe. Eine ausführliche Dokumentation hierzu findet sich auch im Internet³. Innerhalb dieses Vorhabens wurden auch wesentliche Modifikationen an den algorithmischen Kernen der sequentiellen Codes vorgenommen.

Ein wichtiger Schritt war hierbei der Übergang von direkten zu iterativen linearen Lösern. Diese ermöglichen in Abhängigkeit von der geforderten Genauigkeit der Integration einen angepaßten Aufwand bei der Berechnung der Lösung der linearen Gleichungssysteme. In Verbindung mit modernen Sparse–Techniken bei der Erzeugung und Speicherung der Matrizen konnte die behandelbare Problemgröße erheblich gesteigert werden. Als optimal hat sich in den meisten Fällen eine Kombination aus BICGSTAB oder GMRES als iterativem Verfahren und einem ILU–Präkonditionierer mit variablem Fill–In und Threshold erwiesen. Die Sparse–Matrix–Technik erlaubt auch eine einfache Realisierung von Strategien der dynamischen Ausdünnung der Jacobi–Matrix, die bei gewissen Problemklassen eine deutliche Verkürzung der Rechenzeiten ermöglicht.

³<http://www.zib.de/SciSoft/seneca>

Ein weiteres Problem bei der Integration differentiell–algebraischer Systeme ist häufig das Fehlen genauer konsistenter Startwerte. Bisher wurde versucht, mittels eines impliziten Euler–Schrittes mit sehr kleiner Zeit–Schrittweite solche Startwerte zu berechnen. Dieses Verfahren ist aber sehr aufwendig und in manchen Fällen nicht robust. Ist ein häufiger Neustart der Integration notwendig, wie etwa in SENECA durch die Änderung der Aerosolverteilung, so ist diese Vorgehensweise äußerst ineffizient. Daher wurde in Erweiterung einer von BROWN ET AL. vorgeschlagenen Methode ein Verfahren entwickelt, das extrapolierte Newton–Iterationen realisiert, ohne künstliche Zeitschritte zu verwenden. Es liefert konsistente Startwerte und Zeitableitungen nur durch Anpassung der algebraischen Variablen. Typischerweise sind gerade diese in der Praxis nur schlecht bekannt. Mit Hilfe dieses Verfahrens konnten die Zeiten für die Berechnung konsistenter Startwerte außerordentlich verkürzt werden, gewisse Modellierungen konnten so überhaupt erstmals gerechnet werden. In Verbindung mit optimierten iterativen Lösungsverfahren wurden so Rechenzeitverkürzungen um bis zu 90% ermöglicht.

Trotz der mit iterativen Lösern erzielten guten Ergebnisse ist für realitätsnahe Simulationen eine Parallelisierung des Programms unumgänglich. Obwohl die Zahl der partiellen Differentialgleichungen, die jedem Gitterpunkt zugeordnet sind, stark variiert und sich zudem zeitlich ändert, konnte die algorithmische Methodik des parallelen LIMEX nach geeigneten Modifikationen in SENECA übernommen werden.

Die Implementation dieser Ansätze ergibt eine parallele SENECA–Version, die auf distributed–memory Maschinen wie den Cray T3D– und Cray T3E–Anlagen des ZIB außerordentlich gut skaliert und Speedups von etwa 20 auf 32 Prozessoren ermöglicht — siehe Abbildung 2.8. Als Grundlage für die Kommunikation dienen entweder die Shared–Memory Routinen von Cray Inc. oder MPI. Die MPI–basierte Version ist auch auf Workstation–Clustern lauffähig und wird hier schon aus Gründen des Speicherplatzbedarfs für sehr große Probleme benötigt. Auf heterogenen Clustern ist infolge der unterschiedlichen Auslastung und Leistungsfähigkeit der CPUs ein dynamisches Load–Balancing notwendig. Erste Ansätze zeigen bereits ein vielversprechendes Verhalten. Damit können auf Workstation–Clustern nun Problemklassen angegangen werden, deren Lösung bisher an Speicherplatzproblemen scheiterte. Insbesondere kann nun die Zahl der Tropfenklassen weiter gesteigert werden und die Modellierung der Aerosole bezüglich Größe und Schadstoffkonzentration verfeinert werden.

Die Leistungsfähigkeit des Programmpakets SENECA macht es inzwischen auch zu einem interessanten Werkzeug für die Industrie. In den letzten zwei Jahren haben eine Vielzahl von Firmen Auftragsrechnungen mit SENECA durchführen lassen.

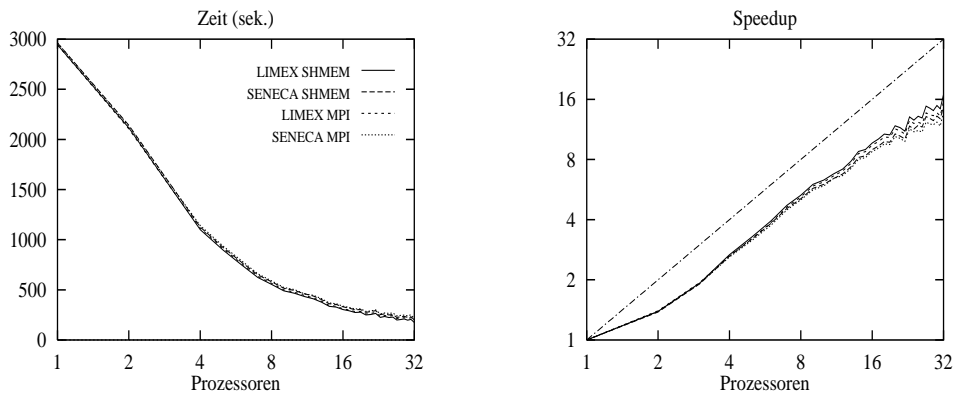


ABBILDUNG 2.8: Performance Ergebnisse der Simulation der HCl-Absorption mit 12 Tropfenklassen

KARDOS in der Halbleitertechnik

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: W. Merz, K.-H. Hoffmann (TU München)

Das elektrische Verhalten eines Halbleiters wird durch das Einbringen von Fremdatomen (sogenannte Dopanten, meist Phosphor, Bor oder Arsen) ins Kristall gesteuert. Die Bewegung solcher Dopanten erfolgt mittels eines komplizierten, indirekten Diffusionsvorgangs, der Paardiffusion. Weil die experimentelle Bestimmung von Dotierungsprofilen insbesondere für dicht gepackte, dreidimensionale Strukturen extrem zeit- und kostenaufwendig ist, wird viel Wert auf eine zuverlässige numerische Simulation gelegt.

Die Modellierung der Dopanten-Diffusion führt auf ein stark nichtlinear gekoppeltes System von vier Drift-Diffusions-Reaktions Gleichungen, einer gewöhnlichen Differentialgleichung und einer Poisson-Gleichung. Grundsätzlich sind die Dopanten (A) an Gitterplätze gebunden und unbeweglich. Erst durch Kopplung an Punktdefekte (Leerstellen V und Zwischengitteratome I) werden sie zu beweglichen Paaren (AI und AV), siehe Abbildung 2.9. Die Paarbildung wird durch verschiedene Reaktionen erster Ordnung modelliert, die Bewegung von Punktdefekten und Paaren erfolgt durch Diffusion.

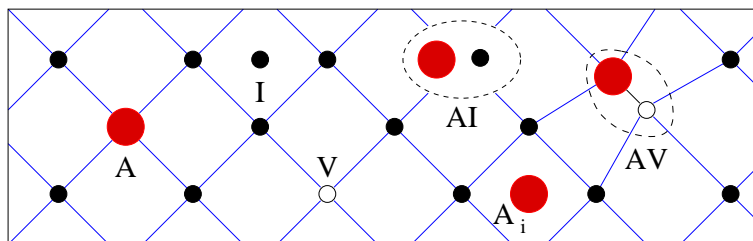


ABBILDUNG 2.9: Mechanismus der Paardiffusion

Die Paare und Punktdefekte treten in verschiedenen Ladungszuständen auf, deren Verteilung durch die Fermi–Statistik beschrieben werden kann. Bei hohen Konzentrationen entwickelt sich ein internes elektrisches Feld im Halbleiter, das die Diffusion der verschiedenen Ladungszustände verschieden stark beeinflusst.

Die Randbedingungen werden mittels vom Potential abhängigen Gleichgewichtsgrößen modelliert und sind damit stark nichtlinear. Werden zusätzlich Grenzflächeneffekte, wie oxidationsbeschleunigte Diffusion betrachtet, kann dies durch Modifikation der Dirichlet–Randbedingungen erreicht werden. Zudem müssen während Oxidationsprozessen an den Grenzflächen zwischen Oxid und Silizium zusätzlich Segregationsbedingungen eingehalten werden.

Zur numerischen Behandlung des nichtlinearen Systems wurde KARDOS herangezogen. Die automatische Adaptivität in Zeit und Raum erweist sich hierbei als äußerst nützlich, da verschiedene Zeitskalen und steile Konzentrationsprofile aufgelöst werden müssen. Die Einstellung des elektrischen und chemischen Gleichgewichts erfolgt in wenigen Augenblicken, während die räumliche Umverteilung im Stundenbereich verläuft.

Die Abbildung 2.10 zeigt ein errechnetes Phosphorprofil und das automatisch angepaßte Gitter nach 30 Minuten als Ergebnis einer 2D–Umverteilung eines implantierten Gaußschen Profils. Der charakteristische Kink ist deutlich zu erkennen.

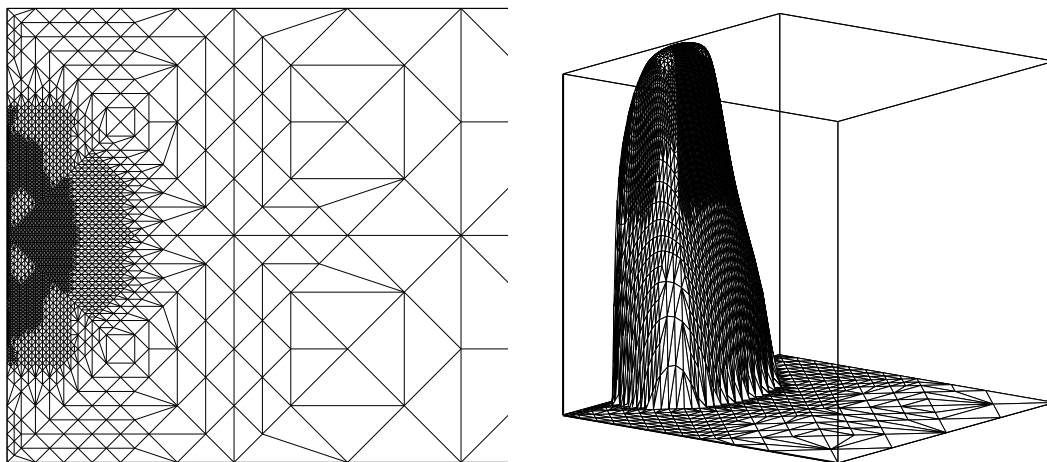


ABBILDUNG 2.10: Adaptives Ortsgitter und Phosphorprofil nach 30 Minuten

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Thermische Leitfähigkeit (Bodo Erdmann)

In Zusammenarbeit mit der Universität Lissabon, Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais (M.J. Lourenço, C.A. Niete de Castro) wurde KARDOS eingesetzt, um die thermische Leitfähigkeit λ von Materialien im hocherhitzten, flüssigen Zustand zu mo-

dellieren. Aus der zeitlichen Wärmeentwicklung bei Anlegen einer Spannung in einem eingetauchten Sensor soll auf die Leitfähigkeit des Liquids geschlossen werden. Die Gleichung

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q \quad (2.1)$$

beschreibt die Wärmeleitung, wobei C_p die Wärmekapazität, ρ die Dichte und Q die durch eine elektrische Spannung erzeugte Wärme je Volumeneinheit bezeichnet. Das unbekannte λ wird iterativ über das Lösen der Gleichung 2.1 angenähert, gute Startwerte sind bekannt. Zur Zeit wird eine zweidimensionale Simulation realisiert. Eine besondere Schwierigkeit stellt die komplizierte Geometrie der Sensorbestandteile dar. Das Startgitter wurde mit dem vorhandenen Baukasten zur Gittergenerierung erzeugt. Die Arbeiten werden fortgesetzt.

Parallelisierung von PDEX (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard, gefördert von SGI/Cray, München)

Die für die Parallelisierung des Programms LIMEX entwickelten algorithmischen Methoden wurden in das in Raum und Zeit adaptive Programmpaket PDEX1M implementiert. Erste vielversprechende Resultate wurden für komplexe Anwendungen des Instituts für chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart (J. Frauhammer, G. Eigenberger) erreicht. Bei der Simulation der katalytischen Entzündung von Methan an einer Platinoberfläche konnte etwa auf der Cray T3E mit 32 Prozessoren eine Beschleunigung um den Faktor 8 erzielt werden. Um die Skalierung weiter zu verbessern, können die Grobgitter- und Feingitter-Integration parallel auf getrennten Prozessor-Teilmengen vorgenommen werden. Die Kooperation wird derzeit fortgeführt, um eine robuste parallele Version des Programmpakets PDEXPACK zu entwickeln, das in einer Vielzahl von Anwendungen der Verfahrenstechnik eingesetzt wird.

Kombinationsreaktor (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Jens Lang)

Mit dem Institut für Bioverfahrenstechnik und Reaktionstechnik der Universität Halle-Wittenberg (R. Adler, M. Schreier, M. Bauer, Th. Hennig) wurde eine Kooperation begonnen. Langfristiges Ziel der gemeinsamen Anstrengungen ist die Entwicklung einer Simulations- und Optimierungsumgebung für den in Halle entwickelten speziellen Kombinationsreaktor. Dieses Baukastensystem bietet aufgrund der Kombinierbarkeit von Reaktorschüssen unterschiedlicher Geometrie und Funktion mit Meßvorrichtungen vielfältige Möglichkeiten zur Umsetzung neuer Strategien für die Katalysatorforschung und für die experimentelle Verfahrensneu- oder Weiterentwicklung. In einem ersten Schritt wurden die Codes LIMEX und KARDOS1D/2D zur Simulation zweier unterschiedlicher Reaktorrealisierungen eingesetzt. Erste Testrechnungen zeigen das hohe Maß an Effizienz und Robustheit der Verfahren.

Publikationen

- [1] R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard: *Massively Parallel Linearly–Implicit Extrapolation Algorithms as a Powerful Tool in Process Simulation*. Preprint SC 97-43, ZIB, 1997, erscheint in *Advances in Parallel Computing*.
- [2] J. Lang, B. Erdmann, R. Roitzsch: *Adaptive Time-Space Discretization for Combustion Problems*. In: A. Sydow (editor), *15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Vol. 2*, Numerical Mathematics. 149–155, (Wissenschaft und Technik Verlag, Berlin, 1997)
- [3] J. Lang, W. Merz: *Numerical Simulation of Single Species Dopant Diffusion in Silicon under Extrinsic Conditions*. Preprint SC 97–47, ZIB, 1997, eingereicht bei *SIAM Journal on Scientific Computing*.
- [4] U. Nowak, R. Ehrig, L. Oeverdieck: *Parallel Extrapolation Methods and Their Application in Chemical Engineering*. Preprint SC 97–69, ZIB, 1997.

2.2.5 Hochfrequente Elektrotechnik

In diesem Schwerpunkt werden Problemstellungen untersucht, die sich aus der numerischen Lösung der Maxwell'schen Gleichungen ergeben. Dabei stehen Methoden zur Behandlung der zeitharmonischen Maxwell'schen Gleichungen im Vordergrund. Die in den Anwendungsprojekten auftretenden typischen Frequenzen reichen hier von etwa 100 Megahertz (Radiowellenbereich) bis hin zum Terahertz-Bereich (Infrarot-Bereich des Lichts, integrierte Optik).

Multilevel–Verfahren für die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen

Bearbeitet von: Rudolf Beck, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: R. Hiptmair, R.H.W. Hoppe (Universität Augsburg), B. Wohlmuth (z.Zt. Courant Institute of Mathematical Sciences, New York, USA)

Förderung: Sonderforschungsbereich 273 (Hyperthermie: Methodik und Klinik) der DFG

Hier wurde an weiteren Verbesserungen im Bereich adaptiver Finite-Elemente-Verfahren für Kantelemente (Whitney-Basen) gearbeitet. Kantelemente erlauben die physikalisch konsistente Modellierung elektromagnetischer Felder in inhomogenen Medien und an nicht-glatten metallischen Oberflächen.

Sowohl für theoretische Untersuchungen von Diskretisierungs-Schemata als auch für die Konstruktion effizienter numerischer Algorithmen ist die Zerlegung der Felder in wirbel- und quellenfreien Anteile (Helmholtz-Zerlegung) ein wichtiges Hilfsmittel. Der wirbelfreie Anteil läßt sich als Gradient eines Potentialfelds darstellen und entspricht dem Nullraum des Rotationsoperators in den Maxwell'schen Gleichungen. Er kann bei Kantelementen in einer konventionellen Lagrange-Basis dargestellt und

damit auch algorithmisch gesondert behandelt werden. Transferoperationen zwischen Lagrange- und Whitney-Basen sind dabei geradezu trivial.

Mit dieser Technik wurde ein Mehrgitter-Verfahren entwickelt, das auf einer hybriden Glättungsoperation in Whitney- und Potentialraum beruht. Die Konvergenzraten sind auch im Fall stark variierender Materialkoeffizienten und einspringender Ecken nahezu unabhängig von der Verfeinerungstiefe des Finite-Elemente-Gitters.

Zur lokalen Gitterverfeinerung wurden ein *residuen-basierter* sowie ein *hierarchischer Fehlerschätzer* implementiert. Auch diese beruhen auf der oben angeführten Helmholtz-Zerlegung. In numerischen Experimenten verbrauchte ersterer wesentlich weniger Rechenzeit, lieferte aber auch weniger zuverlässige Schranken für den Diskretisierungsfehler. Die adaptiv erzeugten Gitter unterschieden sich bei beiden Schätzern nicht wesentlich.

Tabelle 2.1 demonstriert die Effizienz des hybriden Mehrgitter-Verfahrens für mehrere Verfeinerungsstufen eines adaptiven Gitters. Hier wurden Feldberechnungen bei zwei verschiedenen Frequenzen an einer inhomogenen 3D-Mikrostreifenleitung mit Taperstruktur vorgenommen. Tabelle 2.2 zeigt die Resultate der Fehlerschätzer. Offensichtlich tritt beim residuen-basierten Schätzer ein Skalierungsfaktor von ≈ 5 auf.

Level	1	2	3	4	5	6	7
Freq = 0.01 GHz	22 (604)	21 (5934)	21 (16983)	21 (37363)	21	22	23
Freq = 1 GHz	31 (239)	31 (1414)	29 (3539)	28 (6729)	30	31	34

TABELLE 2.1: Anzahl der Iterationen eines vorkonditionierten CR-Lösers die benötigt werden, um das ursprüngliche Residuum um zehn Größenordnungen zu reduzieren. Als Vorkonditionierer wurde ein Mehrgitter-V-Zyklus mit hybridem Glätter verwendet. In Klammern ist die Iterationszahl für einen V-Zyklus ohne hybriden Glätter angegeben.

Level	0	1	2	3	4	5	Fehlerschätzer
Freq = 0.01 GHz	0.79	0.78	0.80	0.85	0.89	1.02	<i>hierarchisch</i>
Freq = 1 GHz	0.67	0.69	0.78	0.81	0.88	0.97	
Freq = 0.01 GHz	3.84	4.00	4.27	4.46	4.72	5.42	<i>residuen – basiert</i>
Freq = 1 GHz	3.41	4.41	4.77	4.94	5.47	5.81	

TABELLE 2.2: Verhältnis von geschätztem zu wahren Diskretisierungsfehler.

Eigenlösungen von verlustbehafteten optischen Komponenten

Bearbeitet von: Tilman Friese, Frank Schmidt, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Dr. Reinhard März, Siemens AG München

Förderung: BMBF im Rahmen der Förderung von anwendungsorientierten Verbundprojekten auf dem Gebiet der Mathematik.

Die Kenntnis der Eigenmoden bestimmter optischer Strukturen ist ein wichtiges Hilfsmittel beim Entwurf integriert optischer Schaltkreise. Durch mathematische Modellbildung läßt sich die Berechnung solcher Moden auf die Lösung des Eigenwertproblems der skalaren Helmholtzgleichung

$$-\Delta u(x, y) - f(x, y)u(x, y) = \lambda u(x, y)$$

auf einem beschränkten, zweidimensionalen Gebiet Ω mit Dirichlet-Randbedingung $u(x, y) = 0$ für $(x, y) \in \partial\Omega$ zurückführen, wobei die Funktion f die Materialkonstanten der in der Struktur vorkommenden optischen Halbleiter enthält. Es sind hierbei die Eigenlösungen zu den Eigenwerten mit kleinstem Realteil von Interesse.

Die betrachteten Komponenten sind gekennzeichnet durch einen Multiskalencharakter, große und abrupte Brechzahlübergänge und komplexe Brechzahlen mit teilweise großen Imaginärteilen. Die im Vorjahr entwickelte nichtlineare Mehrgitter-Methode [2] zur Lösung der resultierenden nichtselbstadjungierten Eigenwertprobleme im Kontext adaptiver Gitter konnte im Berichtszeitraum unter anderem zur Berechnung der geführten Moden der in Abbildung 2.11 dargestellten optischen Struktur einge-

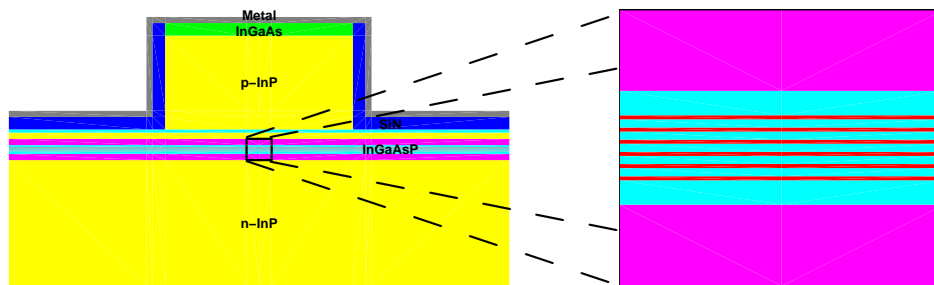


ABBILDUNG 2.11: Querschnitt der optischen Komponente mit Zoom.

setzt werden. Die Brechzahl ist komplexwertig und parameterabhängig in den Multi-Quantum-Well-Schichten (den dünnen Streifen im Zoom von Abbildung 2.11). Da diese sehr dünnen, aber funktionsbestimmenden Schichten (das Verhältnis der Schichtdicke zur Gesamthöhe der Struktur ist 1:1000) mit normal geformten Dreiecken aufgelöst werden müssen, besteht das in Abbildung 2.12 links gezeigte Grobgitter bereits aus 2515 Knoten und 4956 Dreiecken.

In einem der numerischen Experimente wurden die zwei Eigenwerte mit kleinstem

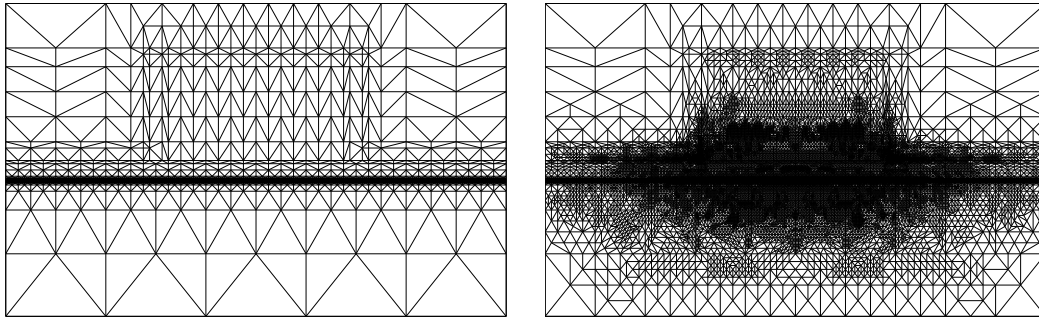


ABBILDUNG 2.12: Start- und Endtriangulierung.

Realteil und die dazu korrespondierenden Eigenlösungen zu einem festen MQW-Parameterwert bestimmt. Das nach 6 Verfeinerungen erreichte Endgitter mit 15246 Knoten und 30396 Dreiecken ist in Abbildung 2.12 rechts dargestellt. Um die pro Gitter entstehenden algebraischen Eigenprobleme auf eine Genauigkeit von 10^{-3} im Resi-

Gitter	1	2	3	4	5	6
Anzahl innerer Knoten	2564	2888	3987	5536	9422	15152
Mehrgitter-Iterationen	3	3	4	4	4	4

TABELLE 2.3: Anzahl innerer Knoten und Mehrgitter-Iterationen pro Gitter.

duum zu lösen, waren asymptotisch 4 V-Zyklen auszuführen (siehe Tabelle 2.3). Eine Darstellung der Intensitätsverteilung der berechneten Eigenlösungen u_1 und u_2 ist in

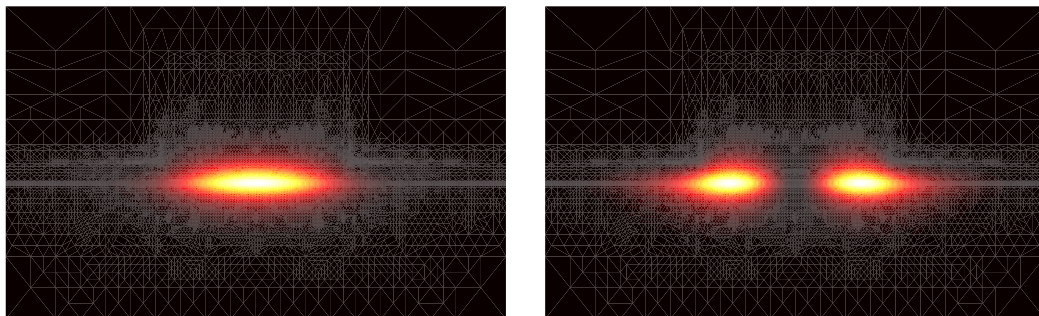
ABBILDUNG 2.13: Intensitätsverteilung der Moden u_1 und u_2 .

Abbildung 2.13 gegeben. Die CPU-Zeit für die gesamte Rechnung mit dem MATLAB-Programmpaket [3] betrug 16 Minuten auf einer Sun Ultra 1 Workstation.

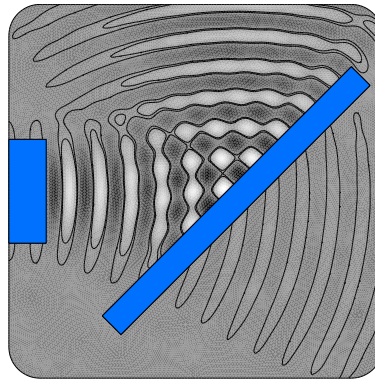


ABBILDUNG 2.14: Reflexion, Brechung und Beugung eines über einen Wellenleiter eingekoppelten Lichtstrahls an einem dünnen, dielektrischen Spiegel

Diskrete transparente Randbedingungen für die Helmholtzgleichung

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: D. Yevick (Queen's University Kingston, Kanada)

Den richtigen Rahmen zur klassischen Behandlung optischer Phänomene bilden die zeitharmonischen Maxwell'schen Gleichungen. Viele optische Komponenten lassen sich jedoch ausreichend genau durch die weniger komplizierte Helmholtzgleichung

$$\Delta u(x, y) + n^2(x, y)k_0^2 u(x, y) = 0,$$

hier ist $n(x, y)$ die Brechzahlverteilung und k_0 die Wellenzahl im Vakuum, beschreiben. Die Helmholtzgleichung stellt ein typisches Randwertproblem dar, d. h. zu ihrer numerischen Lösung müssen noch geeignete Randbedingungen auf der Berandung des Simulationsgebietes vorgegeben werden. Die in diesem Zusammenhang üblicherweise verwendeten Methoden verlangen a-priori eine genaue Kenntnis des Lösungsverhaltens im Außenraum, z. B. des Abklingverhaltens der Lösungen (bei den infinite-Elemente Methoden), oder die Kenntnis von Fundamentallösungen (bei den Randelementmethoden). Das im Rahmen des Projekts entwickelte Konstruktionsschema verfolgt eine andere Strategie. Dabei wird das innere Problem in klassischer Weise in ein Variationsproblem überführt. Das äußere Problem dagegen wird als Anfangswertproblem bzgl. der radialen Variablen aufgefaßt und approximativ mit Hilfe der Laplace-Transformation gelöst. Die nun als Anfangsbedingung erscheinenden Randbedingungen werden in ihrer Vielfalt so eingeschränkt, daß nur aus dem inneren Gebiet herauslaufende Wellen zugelassen werden. Diese Methode läßt sehr allgemeine innere Gebiete und auch inhomogene Außenräume zu. Das Bild zeigt die Reflexion eines Lichtstrahls an einem dünnen, dielektrischen Spiegel. Der Lichtstrahl wird über einen Wellenleiter eingekoppelt, der Außenraum wird somit inhomogen. Neben der Reflexion tritt auch Brechung und Beugung auf. Die dabei erzeugten Wellen verlassen das Rechengebiet ungehindert.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Adaptive Finite-Elemente-Verfahren zur Berechnung von Streumatrizen in Wellenleitern (Rudolf Beck, Peter Deuffhard, Kooperation: A. Maurer, R. Sporer und P. Turban, Siemens AG, Erlangen)

Die Simulation von elektromagnetischen Feldern stellt ein wichtiges Hilfsmittel für die Analyse und den Entwurf von Bauelementen in der Mikroelektronik dar. Im Hochfrequenzbereich, der bei heutigen Strukturgrößen typischerweise eine Bandbreite von 50 GHz umfaßt, wird das Übertragungsverhalten solcher Elemente in der Regel durch Streumatrizen beschrieben.

Schwierigkeiten bei der Feldsimulation ergeben sich insbesondere durch die Kanten der Leiterbahnen, an denen die Felder singular werden können. Diesem Phänomen wird durch den Einsatz von Kantenelementen und lokaler Gitterverfeinerung Rechnung getragen (siehe Abschnitt "Multilevel-Verfahren für die zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen"). Zusätzlich wurde durch eine Modifikation die Modellierung flacher, quasi zweidimensionaler Streifenleiter ermöglicht, wodurch Tetraeder mit ungünstigem Aspektverhältnis an den Rändern solch flacher Strukturen vermieden werden können. Erste Beispielsrechnungen wurden im Berichtszeitraum durchgeführt, wobei sich auch hier die optimale Komplexität des Multilevel-Verfahrens zeigte.

Publikationen

- [1] R. Beck, P. Deuffhard, R. Hiptmair, R.H.W. Hoppe, and B. Wohlmuth. *Adaptive Multilevel Methods for Edge Element Discretizations of Maxwell's Equations*. Preprint SC 97-66, ZIB, 1997.
- [2] P. Deuffhard, T. Friese, and F. Schmidt. *A Nonlinear Multigrid Eigenproblem Solver for the Complex Helmholtz Equation*. Preprint SC 97-55, ZIB, 1997.
- [3] T. Friese. *Matlab-Programme zur Lösung von Eigenwertproblemen mit einem adaptiven, nichtlinearen Mehrgitter-Verfahren*. Technical Report TR 97-01, ZIB, 1997.
- [4] T. Friese. *On the Computation of Eigenmodes of Integrated Optical Components*. Preprint SC 97-57, ZIB, 1997.
- [5] F. Schmidt and D. Yevick. *Discrete Transparent Boundary Conditions for Schrödinger-Type Equations*. *J. Comput. Phys.*, 134:96-107, 1997.
- [6] F. Schmidt. *Construction of Discrete Transparent Boundary Conditions for Schrödinger-Type Equations*. Preprint SC 97-60, ZIB, 1997.
- [7] F. Schmidt. *Computation of Discrete Transparent Boundary Conditions for the 2D Helmholtz Equations*. Preprint SC 97-64, ZIB, 1997.

2.2.6 Medizinische Planungssysteme

Im Zentrum der Aktivitäten stand weiterhin das Thema *Hyperthermie*. Dabei handelt es sich um ein Verfahren der Krebstherapie, bei dem Tumorgewebe durch kontrollierte Radiowelleneinstrahlung auf Temperaturen von 42 bis 44°C erwärmt wird.

Die vielfältigen Forschungsarbeiten zur Hyperthermie-Planung fanden ihren Niederschlag im Planungssystem *HyperPlan*. Viele der Werkzeuge, die dieses System zur Lösung der Teilaufgaben einer Therapieplanung anbietet, sind nicht auf die Hyperthermie-Planung beschränkt, sondern lassen sich sowohl für andere medizinische Anwendungen als auch außerhalb der Medizin (siehe Schwerpunkt *Virtuelle Labors*) nutzen. Dazu gehören insbesondere der *General Image Editor (GI)* zur interaktiv gesteuerten Segmentierung von 3D-Bilddaten, die Werkzeuge zur Erzeugung anatomisch getreuer Gittermodelle aus solchen Bilddaten sowie die leistungsfähigen Module zur Visualisierung und 3D-Interaktion. Auch das neue Thema *deformierbare anatomische Modelle* besitzt eine große Palette möglicher Anwendungen.

Generierung von anatomisch getreuen Gittermodellen

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Martin Seebaß, Malte Zöckler, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Susan Wegner, Helmut Oswald (Deutsches Herzzentrum Berlin), Peter Wust, Johanna Gellerman (Virchow-Klinikum, Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, Hyperthermie: Methodik und Klinik

Methoden zur individuellen computergestützten Therapieplanung gewinnen in der Medizin zunehmend an Bedeutung. Eine wesentliche Voraussetzung für derartige Verfahren ist die Erzeugung anatomisch getreuer Gittermodelle aus 3D-Bilddaten. Entsprechende Algorithmen wurden im Berichtszeitraum implementiert und weiterentwickelt. Mit Hilfe dieser Algorithmen konnten im Planungssystem *HyperPlan* leistungsfähige Werkzeuge bereitgestellt werden, welche die Erstellung komplexer anatomischer Tetraeder-Modelle auch klinischen Nutzern ermöglichen. Konkret besteht die Gittergenerierung aus folgenden Schritten:

1. interaktiv gesteuerte Segmentierung der 3D-Bilddaten mit Hilfe eines leistungsfähigen Bildeditors (GI),
2. Erstellung einer polygonalen Approximation der Gewebegrenzflächen mit einem verallgemeinerten Marching Cubes Verfahren (GMC),
3. topologisch konsistente Vereinfachung der Gewebegrenzflächen durch sukzessive Kantenreduktion
4. und – ausgehend von der vereinfachten Grenzflächenbeschreibung – Erstellung eines Volumengitters mit einem Advancing-Front-Verfahren.

Algorithmische Neuentwicklungen wurden insbesondere für die Schritte 2. und 3. durchgeführt. Das GMC-Verfahren gestattet es, aus einem entsprechend segmentierten 3D-Bilddatensatz eine Triangulierung der Gewebegrenzflächen zu extrahieren. Es wird nacheinander jede kubische Gitterzelle durchlaufen und ihr Beitrag zu den Grenzflächen bestimmt. Für den überwiegenden Teil der Gitterzellen kann die Triangulierung einer Tabelle entnommen werden, so daß das Verfahren extrem schnell ist. Eventuell vorhandene Information über die Wahrscheinlichkeit, mit der die Bildpunkte zu einem Gewebetyp gehören, kann dazu genutzt werden, auch bei geringer Auflösung der Bilddaten glatte Grenzflächen zu erzeugen. Es ist garantiert, daß die resultierende Triangulierung topologisch konsistent und überschneidungsfrei ist [5].

Die Flächen, die das GMC-Verfahren erzeugt, bestehen typischerweise aus einigen hunderttausend Dreiecken und sind damit für viele Zwecke noch zu fein aufgelöst. Deshalb muß nachfolgend eine Vereinfachung der Flächen durchgeführt werden, die die Zahl der Dreiecke um einen Faktor 10 – 20 reduziert. Hierzu wurden entsprechende Verfahren aus der Computergrafik [4] weiterentwickelt, so daß die vereinfachten Flächen weiterhin topologisch korrekt bleiben und mögliche Überschneidungen effizient vermieden werden.

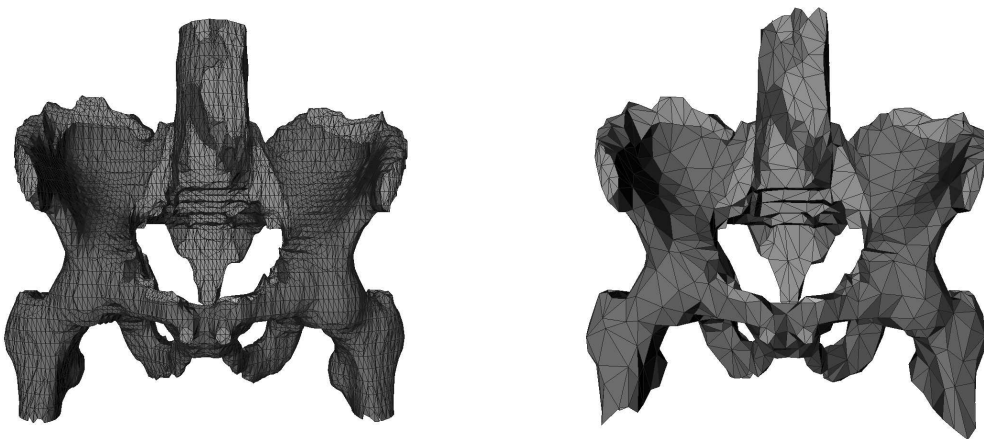


ABBILDUNG 2.15: Oberfläche des Beckenknochens als Resultat des GMC-Verfahrens (links) und nach der Vereinfachung (rechts). Die Zahl der Dreiecke für das komplette Modell wurde von ca. 270.000 auf 18.000 reduziert. Hellgrau: Grenzfläche Knochen – Fett, dunkelgrau: Grenzfläche Knochen – Muskel.

Nichtlineare Perfusion beim Wärmetransport

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Martin Seebaß, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Peter Wust, Johanna Gellerman (Virchow-Klinikum, Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, Hyperthermie: Methodik und Klinik

Grundlage der Simulation einer Hyperthermie-Behandlung ist ein Modell des Wärmetransports im menschlichen Körper. Dabei stellt der Wärmetransport durch das Blut die Hauptschwierigkeit dar. Meist wird als Modell die sogenannte „bio heat equation“ verwendet und jedem Gewebetyp (Muskel, Fett, Knochen, usw.) ein konstanter Perfusionswert zugeordnet. Ein realistischeres Modell erhält man, wenn man berücksichtigt, daß die Perfusion selbst von der Temperatur abhängt [7]. Dadurch wird die bio heat equation zu einer nichtlinearen Gleichung.

Im Berichtszeitraum wurde untersucht, inwieweit ein solches nichtlineares Modell die Ergebnisse der Planung einer regionalen Hyperthermie-Behandlung beeinflusst. Die nichtlineare Wärmetransport-Gleichung wurde mit Hilfe des am ZIB entwickelten Programmpakets KARDOS gelöst [2]. Zur Optimierung der Behandlungsparameter unter Berücksichtigung des nichtlinearen Modells wurde iterativ vorgegangen; das Problem wurde so auf die wiederholte Optimierung eines linearen Modells reduziert [3].

Das nichtlineare Modell liefert folgende Ergebnisse mit klinischer Relevanz [6]:

- Die optimalen Behandlungsparameter unterscheiden sich deutlich von denen, die sich nach dem Modell mit konstanten Perfusionswerten ergeben, und liegen in der Regel näher an einer symmetrischen Antenneneinstellung.
- Wesentlich größere Bereiche des Muskelgewebes werden auf Temperaturen von etwa 40°C erwärmt (siehe Abb. 2.16, links).
- Die Regulationsfähigkeit des Gewebes, die durch das Modell beschrieben wird, wirkt nivellierend auf die Temperaturverteilung; insbesondere werden „hot spots“ im gesunden Gewebe reduziert. Dadurch sagt das nichtlineare Modell eine bessere Erwärmung des Tumors voraus (siehe Abb. 2.16, rechts).

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Vergleich verschiedener Methoden zur Feldberechnung

Bearbeitet von: Rudolf Beck, Jacek Nadobny, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Peter Wust (Virchow-Klinikum, Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, Hyperthermie: Methodik und Klinik

Da im Laufe der Jahre verschiedene Diskretisierungsverfahren zur E-Feldberechnung entwickelt und in der Hyperthermieplanung eingesetzt wurden, erfolgte ein systematischer Vergleich anhand realistischer Patientenmodelle. Es standen dabei folgende Ver-

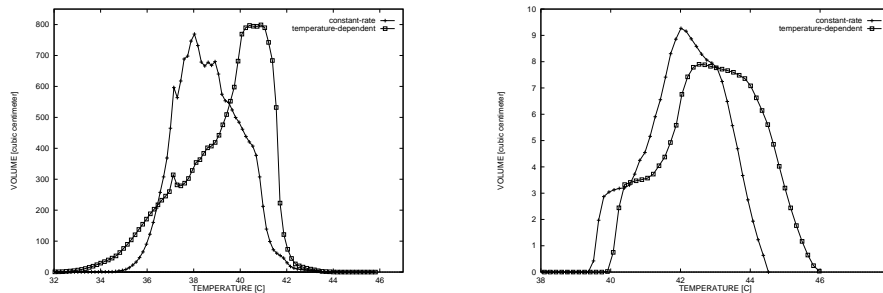


ABBILDUNG 2.16: Temperatur-Volumen-Histogramme für Muskelgewebe (links) und Tumorgewebe (rechts). Die Unterschiede stammen von linearen/nichtlinearen Modellen der Perfusion.

fahren zur Verfügung: die Finite-Elemente-Methode [1], die VSIE (Volume-Surface-Integral Equation Method), ein FDTD-Algorithmus (Finite-Difference-Time-Domain) basierend auf Voxeldaten sowie die FDTD mit Feldkorrektur an den Grenzflächen. Das letztere Verfahren bedient sich bei der Definition der Materialien auf dem Differenzgitter der Tetraedernetze, welche auch bei FE und VSIE Verwendung finden. Dabei zeigte sich, daß nur diese in der Lage sind, klinisch relevante “hot spots” zu erkennen. Tabelle 2.4 zeigt die charakteristischen Eigenschaften der verschiedenen Verfahren.

	Auflösung von 'hot spots'	offene Ränder	Adaptivität	Rechenzeit
Finite Differenzen (TD) (Voxel-basiert)	—	○	○	○
Finite Differenzen (TD) (Korr. mit Tetraedergitter)	○	○	○	○
VSIE (Integralgleichungs- Methode, F)	+	+	○	—
Finite-Elemente- Verfahren (F)	+	○	+	+

TABELLE 2.4: Vergleich verschiedener Verfahren zur E-Feldberechnung (+: gutes, -: schlechtes Verhalten; T: Zeitbereich, F: Frequenzbereich)

Weiterentwicklung von HyperPlan zu einem Produkt

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Jens Tröger, Martin Seebaß, Malte Zöckler, Olaf Paetsch, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Peter Wust (Virchow-Klinikum, Humboldt-Universität zu Berlin), Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH (München), BSD Medical Corporation, Salt Lake City, Utah, USA

Förderung: Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH (München)

Das Planungssystem HyperPlan wird von klinischen Partnern in Berlin und München zu Forschungszwecken eingesetzt. Die kommerziellen Verwertungsrechte an diesem Planungssystem wurden im Oktober 1996 an die Firma Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH abgetreten. Gleichzeitig wurde mit der Firma ein 15-monatiger Entwicklungsplan mit quartalsweisen Releases vereinbart, um das System zu einem kompletten, klinisch einsetzbaren Werkzeug zu machen.

Sehr umfangreiche Software-Arbeiten waren durchzuführen, um die hochgesteckten Ziele dieses Entwicklungsplans zu erreichen. Schwerpunkte der Arbeiten waren funktionelle Erweiterungen zur Grafik und zur Modellerstellung, Vereinfachung der Bedienung, Entwicklung von Schnittstellen zu Simulationsprogrammen, Jobqueues und Scriptsprache. Durch eine Reihe von Maßnahmen wurde das Programmieren von Erweiterungen erleichtert. Des Weiteren wurde Dokumentation für Anwender wie auch für Programmierer erstellt.

Ein weiterer Schwerpunkt waren umfangreiche Praxistests der Software in der Klinik. Mithilfe der Software wurden verschiedene Studien durchgeführt, die zu einem besseren Verständnis der Hyperthermie-Therapie führten.

Das Softwaresystem selbst wurde auf verschiedenen Konferenzen und Ausstellungen präsentiert.

Deformierbare anatomische Modelle

Bearbeitet von: Ulrike Schott, Detlev Stalling, Martin Seebaß, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Peter Wust, Johanna Gellerman (Virchow-Klinikum, Humboldt-Universität zu Berlin Berlin)

Förderung: DFG, Graduiertenkolleg „Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik“

Im Rahmen des Graduiertenkollegs „Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik“ wurde das längerfristige Forschungsthema *deformierbare anatomische Modelle* in Angriff genommen. Ziel ist es, Form- und Lageänderungen innerer Organe, z.B. infolge veränderter Patientenlagerung, durch eine Deformation des Patientenmodells zu berücksichtigen. Es wurde ein Überblick über verschiedene Ansätze und den aktuellen Stand der Forschung erstellt. Zudem wurde mit der Analyse von MRT-

Aufnahmen begonnen, welche Patienten in unterschiedlicher Lagerung zeigen. Dies dient der Untersuchung, welche Deformationen mit Hilfe von Daten berechnet werden können, die in der Therapiesituation zur Verfügung stehen (z.B. Bewegungen des Knochengestüts, der äußeren Oberfläche des Patienten und innerer Landmarks).

Publikationen

- [1] R. Beck, B. Erdmann und R. Roitzsch, *An object-oriented adaptive finite element code and its application in hyperthermia treatment planning*, Modern Software Tools for Scientific Computing (Erlend Arge, Are Magnus Bruaset und Hans Petter Langtangen, eds.), Birkhäuser, 1997.
- [2] B. Erdmann, J. Lang und M. Seebaß, *Adaptive Solutions of Nonlinear Parabolic Equations with Application to Hyperthermia Treatments*, Preprint SC 97–44, ZIB, 1997.
- [3] ———, *Optimization of Temperature Distributions for Regional Hyperthermia Based on a Nonlinear Heat Transfer Model*, Preprint SC 97–59, ZIB, 1997.
- [4] M. Garland und P. S. Heckbert, *Surface simplification using quadric error metrics*, Computer Graphics Proceedings, Addison Wesley, 1997.
- [5] H. C. Hege, M. Seebaß, D. Stalling und M. Zöckler, *A Generalized Marching Cubes Algorithm Based on Non-binary Classifications*, Preprint SC 97–05, ZIB, 1997.
- [6] J. Lang, B. Erdmann und M. Seebaß, *Impact of Nonlinear Heat Transfer on Temperature Control in Regional Hyperthermia*, Preprint SC 97–73, ZIB, 1997.
- [7] D. T. Tompkins, R. Vanderby, S. A. Klein, W. A. Beckman, R. A. Steeves, D. M. Frye und B. R. Paliwal, *Temperature-dependent versus constant-rate blood perfusion modelling in ferromagnetic thermoseed hyperthermia: Results with a model of the human prostate*, Int. J. Hyperthermia **10** (1994), 517–536.

2.2.7 Virtuelle Labors

Naturwissenschaftliche Forschung steht auf den drei Säulen Theorie, Experiment und Simulation. Ein durchgängig begleitendes, teils auch verbindendes Forschungsinstrument ist die Visualisierung. Die unterschiedlichen wissenschaftlichen Herangehensweisen werden in der Forschungspraxis oft vielfach miteinander verschränkt. Es besteht daher Bedarf an integrierten Arbeitsumgebungen, sogenannten „Virtuellen Labors“, die solche unterschiedlichen Forschungsweisen unterstützen.

Übergreifendes Ziel der nachfolgend angeführten Projekte ist die Entwicklung von integrierten, rechnergestützten Arbeitsumgebungen. Die hier entwickelten Software-Systeme bieten neben anwendungsspezifischen Komponenten auch allgemeine Funk-

tionen zur Bildverarbeitung, geometrischen Modellbildung, numerischen Simulation und Visualisierung.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Malte Zöckler, Hartmut Schirmacher, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Klaus Obermayer und Michael Scholz (Fachgebiet Neuronale Informationsverarbeitung, Institut für Kommunikations- und Softwaretechnik, TU Berlin), Randolf Menzel und Giovanni Galizia (AG Neurobiologie, Institut für Tierphysiologie, FU Berlin), Martin Heisenberg und Karlheinz Rein (AG Genetik, Biozentrum, Universität Würzburg), Eckart Gundelfinger und Klaudia Lohmann (Abt. Neurochemie und Molekulare Biologie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg), Werner Zuschratter (Speziallabor Elektronen- und Konfokalmikroskopie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg)

Förderung: BMBF, Projektverbund „Virtuelles Gehirn: Visualisierung von 3D-Strukturen und Funktionen“

Ziel dieses BMBF-Verbundprojektes ist die Erforschung anatomischer neuronaler Systeme. Dabei werden einerseits makroskopische Strukturen bezüglich ihrer funktionellen und anatomischen Eigenschaften untersucht und verglichen, andererseits aber auch Untersuchungen auf dem Niveau einzelner Neuronen durchgeführt. Es sollen in Zukunft auch Modelle neuronaler Netzwerke entwickelt und in ihrer Funktion simuliert werden.

Basis für diese Untersuchungen sind volumenhafte Bilddaten, die mit konfokalen Mikroskopen aufgenommen werden. Zur effizienten Verarbeitung und Analyse solcher Daten bedarf es schneller und interaktiver Visualisierungsmethoden. Durch den Einsatz von moderner 3D-Grafikhardware in Verbindung mit leistungsfähigen Algorithmen wird der Schritt von einer zweidimensionalen, schnittbasierten zu einer wirklichen 3D-Neuroanatomie möglich.

Alle Softwaremodule, die am ZIB und von den Kooperationspartnern entwickelt und verwendet werden, sollen dabei in ein einheitliches Framework integriert werden. Als Software-Plattform wurde dafür vom Projektverbund das am ZIB entwickelte objektorientierte Visualisierungssystem „Ginkgo“ gewählt. Alle Entwicklungsarbeiten geschehen in diesem Software-Rahmen. Für die Teilnehmer des Projektverbundes wurde ein Kurs zur Bedienung und Programmierung von Ginkgo durchgeführt.

Bisher konzentrierten sich die Projektarbeiten auf die Entwicklung von Werkzeugen zur Erstellung von anatomischen Atlanten (in enger Zusammenarbeit mit der AG Heisenberg, Würzburg). Schwerpunkte hierbei waren spezielle Volume-Rendering-Verfahren und Techniken zum interaktiven und automatischen Matchen/Alignieren von anatomischen Objekten (siehe Abbildung 2.17). Dies sind Voraussetzungen, um bestimmte anatomische Strukturen mehrerer Individuen (in diesem Fall Fruchtfliegen) miteinander vergleichen zu können. Erst durch ein „intelligentes“ Mitteln über eine große Zahl wird dann die Definition eines anatomischen Standardmodells möglich.

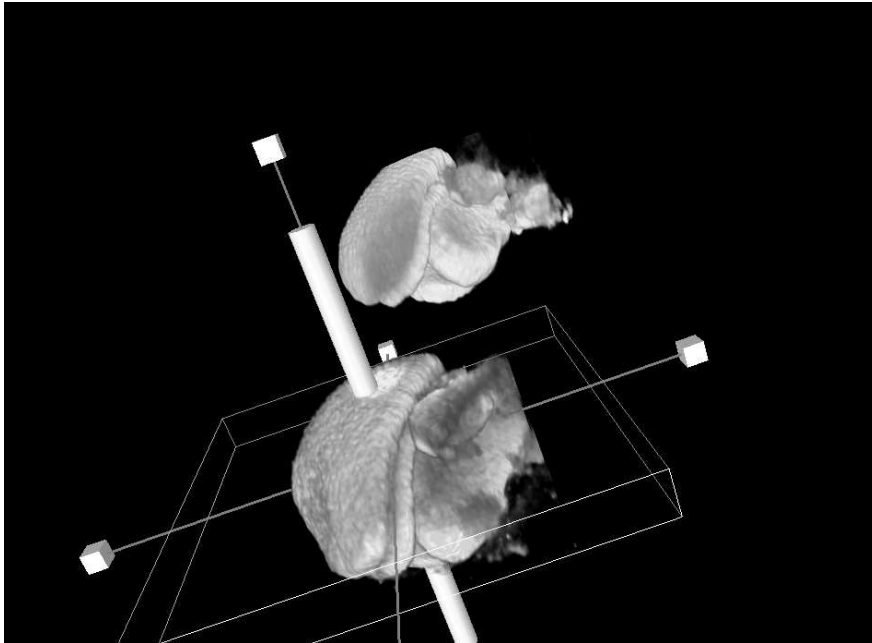


ABBILDUNG 2.17: Bilddaten der optischen Loben zweier Fruchtfliegen werden interaktiv aligniert. Die Darstellung erfolgt durch direktes Volumerendering mittels Texturhardware.

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde mit der Entwicklung von Algorithmen zur Erzeugung von Graphen aus segmentierten Bilddaten von Neuronen begonnen. Diese sollen dann als Grundlage für eine numerische Modellierung der Vorgänge in den neuronalen Systemen dienen.

Virtuelles RNA-Labor

Bearbeitet von: Christoph Best, Hans-Christian Hege, Thomas Steinke

Kooperationspartner: Forschungsverbund BeRNAT (Leitung Volker A. Erdmann, Institut für Biochemie, FU Berlin), Arbeitsgruppe Jörn Manz (Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, FU Berlin)

Zur Visualisierung von biologischen Makromolekülen wurde im Programmsystem HyperPlan ein Interface implementiert, das es gestattet, Daten zu Molekültopologie, -struktur, und -simulation zu importieren. Bereits vorhandene Verfahren zur grafischen Darstellung von Molekülen wurden ausgebaut (siehe Abb. 2.18). Dazu zählen Wireframe- und Ball-and-Stick-Molekülmodelle, Darstellung der Lösungsmitteln zugänglichen Teile von Moleküloberflächen, Visualisierung elektrostatischer Eigenschaften unter Ausnutzung der verschiedenen Darstellungstechniken für Skalar- und Vektorfelder, sowie Animation von Dynamiktrajektorien.

Es wurde damit begonnen, einen Moleküleditor für Biopolymere zu entwerfen, der es durch Anwendung intelligenter Algorithmen erlauben soll, große Moleküle schnell

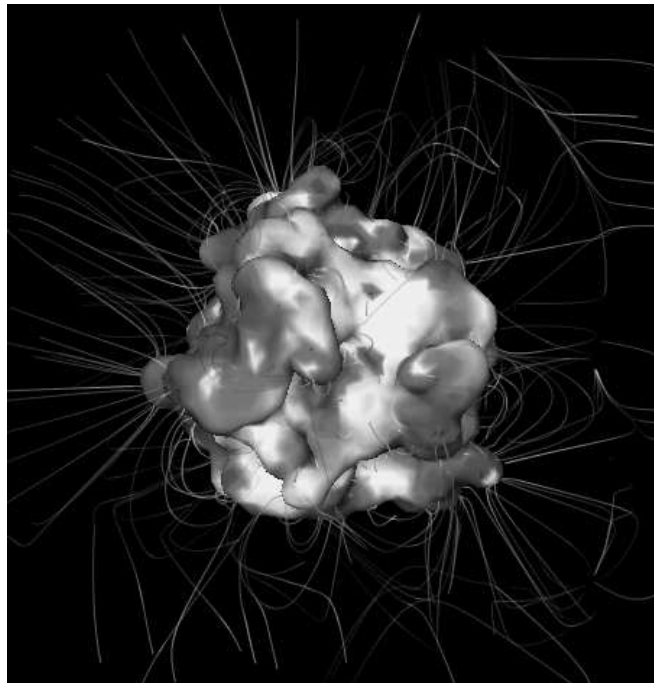


ABBILDUNG 2.18: Elektrostatisches Potential und Feld eines RNA-splattendenden Proteins – dargestellt durch Graustufenkodierung auf der Van-der-Waals-Oberfläche und beleuchtete Stromlinien im Raum.

und benutzerfreundlich zu entwerfen [3], ihre 3D-Struktur zu visualisieren und in engem Zusammenwirken mit molekulardynamischen und quantenmolekulardynamischen [2] Programmen zu analysieren.

Visualisierung chemischer Ratennetzwerke

Bearbeitet von: Johannes Schmidt-Ehrenberg

Kooperationspartner: Erwin Sedlmayr, Holger Beck, Beate Patzer (Institut für Astronomie und Astrophysik der TU Berlin)

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Sedlmayr ein Programm zur visuellen Auswertung von Simulationen chemischer Reaktionsnetzwerke erstellt. Simulationsergebnis und Basis der Auswertung ist eine Reihe von Zeitschritten, an denen die Konzentrationen der Spezies und Raten der Reaktionen angegeben sind. Über die Analyse der zeitlichen Konzentrationsentwicklung der Spezies hinaus ist die Bedeutung der einzelnen Reaktionen und ihres Zusammenspiels für die Dynamik der Konzentrationen aufzuklären.

Zur Visualisierung werden Diagramme erstellt, die neben der strukturellen Information, welche Reaktionen zwischen welchen Spezies vermitteln, auch Konzentrationen und Raten wiedergeben (Abbildung 2.19). Dabei stellt sich unter anderem das Problem des Graphenlayouts [6]. Die bisher praktizierte manuelle Erstellung [1] solcher

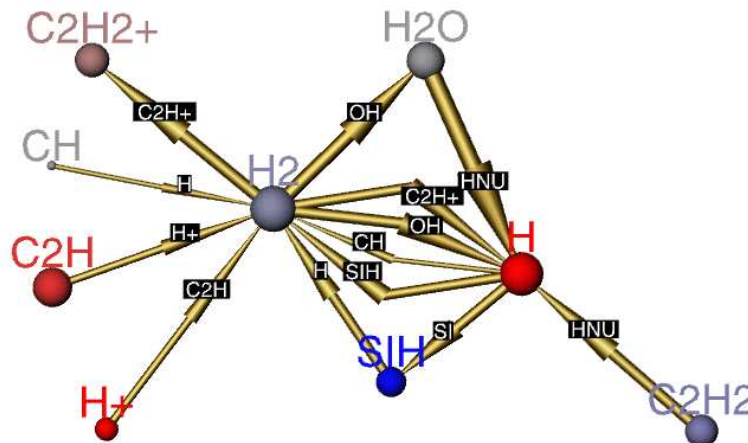


ABBILDUNG 2.19: Ausschnitt des Ratennetzwerkes zu einem festen Zeitpunkt in Form eines gerichteten Graphen – Spezies werden als Kugeln, Reaktionen als Pfeile dargestellt.

Diagramme ist aufwendig. Mit der neu erstellten Software entstehen solche Diagramme auch für sehr umfangreiche Simulationsergebnisse interaktiv. Sie bietet dem Anwender die Möglichkeit, seine Daten nicht nur in grafisch ansprechender Weise zu visualisieren sondern auch interaktiv zu analysieren.

Visualisierung von Meßergebnissen aus Brandschutzexperimenten

Bearbeitet von: Wolfgang Kühn, Olaf Paetsch

Kooperationspartner: Manfred Korzen (BAM, Berlin)

Förderung: Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Im Brandschutzlabor der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung werden Stützen auf ihr Verhalten unter thermischer und mechanischer Last untersucht. Diese Arbeiten dienen sowohl der Vergabe von Feuerschutzklassen als auch der pränormativen Materialforschung zur Verbesserung der Prüfungen.

Ziel dieses Projektes ist es, die Resultate von Brandschutzexperimenten durch visuelle Aufbereitung besser interpretierbar zu machen. Dazu wurde auf Basis eines am ZIB entwickelten objektorientierten Visualisierungssystems die Software 'Firetest' erstellt. Spezifisch für diese Anwendung wurden Module zur Online-Anbindung an das Experiment, spezielle Darstellungsmethoden sowie modellbasierte Interpolationsverfahren mittels FE-Analyse [4] und Datenassimilation [5] entwickelt.

Nahziel ist, durch Auswertung der Interpolationsverfahren und ihrer Fehler die Zahl der notwendigen Meßpunkte (Thermoelemente) sowie deren Plazierung zu optimieren, um aus den Experimenten bessere Daten zu erhalten, bzw. um Prüfungen künftig kostengünstiger durchzuführen.

Publikationen

- [1] H.K.B. Beck, H.-P. Gail, R. Henkel und E. Sedlmayr, *Chemistry in circumstellar shells: I. chromospheric radiation fields and dust formation in optically thin shells of m-giants*, *Astronomy and Astrophysics* **265** (1992), 626–646.
- [2] D. Bicout (Hrsg.), *Quantum mechanical simulation methods for studying biological systems*, Les Houches Workshop, May 2–7, 1995, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [3] J. Brickmann, W. Heiden, H. Vollhardt, C.-D. Zachmann, *New Man-Machine Communication Strategies in Molecular Modelling*, in: Proceedings of the 28th Hawaii International Conference on System Sciences, 1995.
- [4] B. Erdmann, J. Lang and R. Roitzsch, *KASKADE Manual*–Version 2.0, Technical Report TR 93–5, ZIB, 1993.
- [5] G. I. Marchuk und V. P. Shutyaev, *Iteration methods for solving a data assimilation problem*, *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, **9**, No. 3 (1994), 265–279.
- [6] P. Mutzel, *Automatisiertes Zeichnen von Diagrammen*, Forschungsbericht MPI-I-95-1-011, Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken, April 1995, publiziert in: Jahrbuch 1995 der Max-Planck-Gesellschaft, Vandenhoeck und Ruprecht Verlag, Göttingen, 1995.

2.2.8 Allgemeine Relativitätstheorie

Obwohl die Allgemeine Relativitätstheorie schon vor über 80 Jahren entwickelt wurde, wird sie immer noch nicht in allen Aspekten und Details verstanden. Zum einen stehen erst jetzt die technischen Möglichkeiten zur Verfügung, ihre Vorhersagen mit Hilfe von leistungsstarken Computern darzustellen, zum anderen ist die Erforschung und Klassifizierung möglicher Lösungen der Einsteinschen Feldgleichungen ein nach wie vor aktuelles Arbeitsgebiet. Wir arbeiten auf zwei Gebieten, zum einen der Visualisierung von Skalar-, Vektor- und Tensorfeldern, die in Lösungen der Einsteinschen Feldgleichungen auftreten, zum anderen an Methoden zur Ermittlung von Symmetrien anhand von Killingfeldern.



ABBILDUNG 2.20: Simulation eines extrem überhöhten Gravitationsfeldes der Erde im Rahmen der Allgemeinen Relativitätstheorie. So ähnlich würde sich die Erde darstellen, wenn sie ein schwarzes Loch wäre. Die Sterne im Hintergrund - aus der Datenbank des SAO Kataloges der hellsten Sterne bis zur zehnten Größenklasse - werden verzerrt dargestellt wie bei den in der Umgebung großer Galaxien beobachtbaren Gravitationslinseneffekten. Die gesamte Erdoberfläche wird auf einmal sichtbar, da das Licht von allen Seiten in das schwarze Loch hineingezogen wird.

Visualisierungsmethoden

Bearbeitet von: Werner Benger

Kooperationspartner: Ed Seidel (Albert-Einstein-Institut, Potsdam; John Shalf (National Center for Supercomputing Applications NCSA, Urbana-Champaign, Illinois, USA); Wai-Mo Suen (Washington University, St. Louis, USA); Hermann Lederer (Rechenzentrum Garching (RZG) der Max-Planck-Gesellschaft, Garching)

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Das Projekt startete am 01. Dezember. Im Vordergrund steht zunächst die Entwicklung von neuen Methoden zur Visualisierung von Tensorfeldern (metrischer Tensor und Krümmungstensor). Ziele des Kooperationsprojektes sind

- die Bereitstellung von graphischen Hilfsmitteln zur Begutachtung und Analyse der Funktionsweise des Codes zur numerischen Simulation der Einsteinschen Feldgleichungen [3]
- die Erarbeitung und Implementierung von Methoden zur Visualisierung physikalischer Größen (siehe z.B. [1])

- die Entwicklung von Werkzeugen zur Steuerung und Kontrolle von Simulationsabläufen auf Supercomputern in entfernten Netzwerken (z.B. Potsdam-Berlin, München/Garching, Champaign/Illinois).

Es wurden erste Bedarfsanalysen erstellt und mit den in Hyperplan [2] bereits vorhandenen Möglichkeiten verglichen. Ein Hyperplan-Modul zur Darstellung von vierdimensionalen Geodäten aus numerischen Raumzeiten wurde mit Hilfe der „Illuminated Stream Lines“-Technik realisiert. Des Weiteren wurden Codes des NCSA/RZG auf ihre Eignung zur Einbindung in Hyperplan untersucht.

Ein Beispiel für die Visualisierung eines starken Gravitationsfeldes mit Hilfe des Ray-Tracing-Verfahrens zeigt die Abbildung 2.20.

Symmetrien und Erhaltungssätze

Bearbeitet von: Thomas Wolf (ZIB-Fellow)

Kooperationspartner: A. Brand (Klinik für Anästhesiologie und Intensivtherapie, Universität Jena)

Ein wesentliches Kriterium zur Klassifizierung exakter Lösungen der Einsteinschen Feldgleichungen ist die Analyse ihrer Symmetrien, d.h. ihrer Killingvektoren und Killingtensoren. In direktem Zusammenhang damit stehen Erhaltungssätze der Bewegungsgleichungen in diesen Räumen. Im Berichtszeitraum wurden dazu folgende Arbeiten fertiggestellt [4]:

- Entwicklung eines Algorithmus, um die Bestimmungsgleichungen von Killingtensoren *beliebigen* Ranges (ein überbestimmtes partielles DGL-System mit typischer Weise 1000en von Termen) in Strukturgleichungen der Form $(F_A)_{;k} = \sum_B \Gamma_{kAB} F_B$ umzuformulieren, wodurch jegliche Integrierbarkeitsbedingungen die Form von linearen algebraischen Gleichungssystemen annehmen.
- Implementation der entsprechenden Algorithmen in REDUCE. Dies beinhaltete die Erstellung von Routinen zu Manipulation großer Tensorausdrücke einschließlich der Ausfaktorisierung von Symmetrieoperatoren aus Tensorausdrücken.

Durch die Algebraisierung der Lösung dieser partiellen DGL-Systeme wurde es möglich, eine kürzlich durch Meinel/Neugebauer gefundene exakte Lösung der relativistischen rotierenden Staubscheibe auf die Existenz von Killingtensoren 2. Ranges hin zu untersuchen.

Während Killingvektoren und -tensoren linearen Bedingungsgleichungen genügen und Erhaltungssätzen polynomial in den Geschwindigkeiten entsprechen, genügen Killing-Paare nichtlinearen Bedingungsgleichungen und entsprechen Erhaltungssätzen, die rational in den Geschwindigkeiten sind. In diesem Jahr wurde eine Arbeit fertiggestellt ([5]), in der erstmals zumindest für flache Räume alle Killing-Paare bestimmt wurden und gezeigt wurde, daß sich diese auf Killingvektoren reduzieren lassen. Zur Lösung

der überbestimmten nichtlinearen partiellen DGLn wurde das REDUCE Paket CRACK verwendet, welches einer ständigen Weiterentwicklung unterliegt.

In Zusammenarbeit mit Marc Mars entstand eine Arbeit zu kosmologischen Lösungen der Einsteinschen Feldgleichungen mit 2 kommutierenden Killingvektoren und einem konformen Killingvektor [6] Zur Klassifizierung der dabei gefundenen exakten Lösungen wurde das Computeralgebra Programm CRACK zusammen mit anderen Symmetrieprogrammen von T.Wolf und G.Grebot verwendet.

Publikationen

- [1] F.W. Hehl, R.A. Puntigam, H. Ruder (Eds.), *Relativity and Scientific Computing - Computer Algebra, Numerics, Visualization*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.
- [2] *Hyperplan Users Guide*, ZIB, 1997, (Bestandteil der Softwarelieferung).
- [3] E. Seidel and W.-M. Suen, *Review: Numerical Relativity*, International Journal of Modern Physics C, vol. 5, 181 (1994) Also appeared in: Proceedings of the 2nd IMACS Conference on Computational Physics, edited by J. Potvin, World Scientific, Singapore, 1994.
- [4] T. Wolf, T. *Structural equations for Killing tensors of arbitrary rank*, eingereicht zur Publikation im J.Math.Phys., Preprint SC 97-62, ZIB, 1997.
- [5] T. Wolf, *Killing Pairs in Flat Space*, angenommen zur Publikation im GRG Journal (Jan. 1998), Preprint SC 97-58, ZIB, 1997.
- [6] M. Mars, T. Wolf, *G_2 Perfect-Fluid Cosmologies with a proper conformal Killing Vector*, Class. Quantum Grav. 14 (1997), 2303-2330, Preprint SC 97-08, ZIB, 1997.
- [7] T. Wolf, A. Brand, *Examples of the investigation of differential equations with modularized programs*, Mathl. Comput. Modelling 25 (1997), no 8/9, 133 - 139.

2.2.9 Invarianzeigenschaften dynamischer Systeme

Viele Erscheinungen in Natur und Technik werden durch dynamische Systeme beschrieben. Das qualitative Verhalten der Dynamik wird häufig durch zusätzliche Strukturen wie Symmetrien und Invarianzprinzipien bestimmt. Eine Aufgabe besteht darin, diese Strukturen zu erkennen und algorithmisch zu bestimmen. Eine zweite Aufgabe ist die Anpassung von numerischen Algorithmen an die vorhandenen Strukturen.

Symmetrie und Varietäten in dynamischen Systemen

Bearbeitet von: Karin Gatermann

Kooperationspartner: I. Hoveijn (Groningen, Niederlande), A. Lari-Lavassani, W.F. Langford (Waterloo, Kanada), F. Guyard (Nizza, Frankreich), R. Lauterbach (WIAS, Berlin)

Theoretische Untersuchungen der symmetrischen Verzweigungstheorie und äquivarianten Dynamik starten mit einem beliebigen äquivarianten Vektorfeld. Dabei geht man davon aus, daß dieses System ein Resultat einer Liapunov-Schmidt-Reduktion oder einer Reduktion auf Zentrumsmannigfaltigkeit ist. Die Arbeit an dem Paket SYMMETRY [8] zur Ermittlung der symmetrischen Verzweigungsgleichungen wurde im Berichtszeitraum fortgesetzt. Insbesondere für kontinuierliche Gruppen ergaben sich Verbesserungen.

Das Paket SYMMETRY wurde eingesetzt, um die Gleichungen für verschiedene Darstellungen von D_3 und D_4 zu ermitteln. Diese werden in der Arbeit [9] als typische Beispiele von Verzweigungsphänomen untersucht: sekundäre Verzweigung von stationären Lösungen, Hopf-Verzweigung von periodischen Lösungen, sowie symmetrischen Takens-Bogdanov-Punkten.

Bzgl. der kontinuierlichen Gruppen ergab sich eine Verallgemeinerung des Algorithmus von H. Derkson zur Berechnung von Invarianten algebraischer Gruppen auf den Fall der Berechnung von Äquivarianten ([10]). Hier finden sich auch Algorithmen zur Berechnung einer Stanley-Zerlegung und der algorithmischen Noether-Normalisierung von Varietäten. Der bekannte Algorithmus von Logar zur Berechnung der Normalform wurde angepaßt auf die Situation eines verallgemeinerten Grades.

Eine spezielle Methode in der Theorie der dynamischen Systeme ist die der Reduktion auf den Orbitraum. Dabei wird die Symmetrie ausgenutzt, indem modulo der Gruppe gerechnet wird. Das bedeutet, daß die Dynamik entlang eines Gruppenorbits zu einem Punkt zusammengezogen wird. Allerdings ist das resultierende Differentialgleichungssystem nur auf einem Teil einer reellen Varietät mit einer besonderen Struktur definiert. Die neue Idee ist, simultane symmetriegerechte Noether-Normalisierung von ineinander geschachtelten Varietäten zu benutzen. Dadurch zeigt sich die wesentliche geometrische Eigenschaft eines äquivarianten dynamischen Systems auch auf dem Orbitraum. Nähere Ausführungen enthält das letzte Kapitel von [10].

Numerische Integratoren und Rückwärtsfehleranalyse

Bearbeitet von: Sebastian Reich

Kooperationspartner: Uri Ascher (Department of Computer Science, University of British Columbia, Kanada), Ben Leimkuhler (Department of Mathematics, University of Kansas, USA)

Die Rückwärtsfehleranalyse für numerische Integrationsverfahren gewöhnlicher Differentialgleichungen betrachtet das numerische Verfahren als die "exakte" Lösung zu

einem modifizierten Problem. Dabei kann die Exaktheit nur bis auf eine Differenz, die exponentiell mit der Verkleinerung der Schrittweite abklingt, erreicht werden. Im Berichtszeitraum wurde ein Beweis dieser Aussage für eine fixpunktartige Iteration zur Bestimmung der modifizierten Differentialgleichung angegeben [1] und die Konsequenzen dieses Ergebnisses auf die numerische Integration Hamiltonscher Differentialgleichungen untersucht. Dabei lag das Hauptaugenmerk auf symplektischen Verfahren, d.h. Verfahren, die die symplektische Struktur des Phasenraumes erhalten.

Im allgemeinen kann aus der Rückwärtsfehleranalyse für symplektische Integratoren nur die Erhaltung der Energie über exponentiell lange Integrationsintervalle geschlossen werden (bis auf Fluktuationen). Um weitergehende Ergebnisse zu erhalten, wurden die folgenden beiden idealisierten Modellsituationen betrachtet: (i) Hamiltonsche Systeme mit einem schnellen Freiheitsgrad und (ii) Hamiltonsche Systeme mit einer hyperbolischen Poincaré–Abbildung.

Für das erste Modellproblem ist bekannt, daß der schnelle Freiheitsgrad zu einer adiabatischen Invariante führt. Diese Invariante bleibt über exponentiell lange Zeiträume erhalten (bis auf kleine Fluktuationen). Mittels der Rückwärtsfehleranalyse und der Normalformtheorie (siehe [1]) konnte bewiesen werden, daß sich diese Erhaltungseigenschaft auf symplektische Integratoren überträgt [4]. Ein ähnliches Verhalten kann für alle symplektischen Verfahren erwartet werden, wenn diese auf Systeme mit zwei sehr verschiedenen Zeitskalen angewandt werden. Dies gilt jedoch nur für genügend kleine Schrittweiten. Für Probleme im Zusammenhang mit Schrittweiten, die größer als die Periode der schnellen Schwingungen sind, siehe die Arbeiten [2, 3].

Das zweite Modellproblem bezieht sich auf chaotisches Lösungsverhalten und die exponentiell schnelle Verstärkung von Variationen in den Anfangswerten. Bezüglich der Rückwärtsfehleranalyse bedeutet dies, daß nach verhältnismäßig kurzer Zeit die numerische Lösung nicht mehr als die exakte Lösung einer modifizierten Differentialgleichung betrachtet werden kann. Um dieses Problem zu umgehen, bietet sich an, die Rückwärtsfehleranalyse mit dem Beschattungslemma zu verbinden. Wie in der Arbeit [1] gezeigt wurde, läßt sich in diesem Sinne die numerische Trajektorie als die exakte Lösung eines modifizierten Problems mit modifizierten Anfangsbedingungen auffassen. Dies impliziert insbesondere auch, daß symplektische Verfahren zeitliche Erwartungswerte chaotischer Systeme im wesentlichen korrekt reproduzieren.

Ein weiteres Problem chaotischer konservativer Systeme ist die temporäre Existenz sehr unterschiedlicher Zeitskalen. Diese hängen mit dem Auftreten von schwachen Singularitäten (Kollisionen) im Lösungsgebiet zusammen. Hier erweist sich die Verwendung von symplektischen [1] oder reversiblen [5] Verfahren mit variabler Schrittweite als unabdingbar. Im Bild 2.21 wird dies am Beispiel des (chaotischen) anisotropen Kepler-Problems gezeigt [1]. Hier liegt die schwache Singularität im Koordinatensprung.

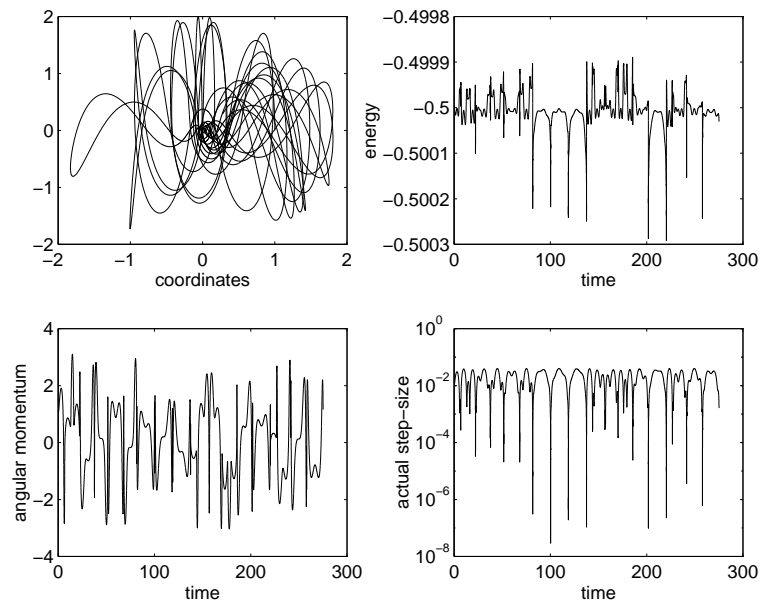


ABBILDUNG 2.21: Integration des anisotropen Kepler-Problems mit einem symplektischen Verfahren variabler Schrittweite.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Gröbner-Basen (Karin Gatermann)

Im Berichtszeitraum wurde die Variante des Buchberger-Algorithmus im Maple Paket MOREGROEBNER, der Hilbert-Reihen ausnutzt, verbessert. Die wesentliche Verbesserung ist, daß Rechnungen über algebraische Körpererweiterungen von Q möglich sind. Bedeutender ist der zweite Punkt des Erkennens einer vorhandenen Gröbner Basis und ihrer Monomordnung. Das Erkennen des Spezialfalles der strukturellen Gröbner-Basis mit Hilfe von maximalen Matchings in einem gewichteten bipartiten Graphen nach Sturmfels und Wiegelmann wurde auf dünnbesetzte Polynome erweitert. Dabei zeigte sich, daß die Annahme von Sturmfels und Wiegelmann etwas zu optimistisch ist, damit alle Fälle von strukturellen Gröbner-Basen zu finden.

Symplektische Mehrgitterverfahren (Sebastian Reich, in Kooperation mit R.D. Skeel, Urbana, USA)

Symplektische Mehrgitterverfahren (multiple-time-stepping) eignen sich zur Langzeitsimulation von Hamiltonschen Systemen mit schnellen und langsamen Freiheitsgraden. Die Idee besteht darin, die schnellen Freiheitsgrade mit einer kleineren Schrittweite als die langsamen Freiheitsgrade aufzulösen. Wie u.a. durch R.D. Skeel gezeigt, besteht die wesentliche Einschränkung dieses Zugangs in numerisch erzeugten Resonanzinstabilitäten. In der Arbeit [1] wurde ein projiziertes Mehrgitterverfahren vorgeschlagen, das diese Resonanzinstabilitäten vermeidet. Im Zusammenhang mit quantenklassischen Simulationen wurde ein symplektisches Mehrgitterverfahren erstmals in

der Arbeit [6] angegeben. Siehe auch 2.2.2.

Publikationen

- [1] S. Reich, *Dynamical Systems, Numerical Integration, and Exponentially Small Estimates*, Habilitationsschrift (eingereicht), Freie Universität Berlin, 1997.
- [2] U. Ascher and S. Reich, *On Some Difficulties in Integrating Highly Oscillatory Hamiltonian Systems*, Preprint SC 97–50, ZIB, 1997.
- [3] U. Ascher and S. Reich, *The midpoint scheme and variants for Hamiltonian systems: advantages and pitfalls*, Preprint SC 97–51, ZIB, 1997.
- [4] S. Reich, *Preservation of Adiabatic Invariants under Symplectic Discretization*, Preprint SC 97–52, ZIB, 1997.
- [5] E. Barth, B. Leimkuhler, and S. Reich, *A semi-explicit, variable step-size, time reversible integrator for constrained dynamics*, Preprint SC 97–53, ZIB, 1997.
- [6] P. Nettesheim and S. Reich, *Symplectic Multiple-Time-Stepping Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*, Preprint SC 97–56, ZIB, Berlin, 1997.
- [7] K. Gatermann, *moregroebner version 2.1*. Maple V.3 Paket zur Berechnung von Gröbner Basen von Idealen und Modulen, Hilbert-Reihen, available by <http://www.zib.de/gatermann/moregroebner.html>, 1997.
- [8] K. Gatermann, F. Guyard, *symmetry version 1.0*. Maple V.3 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik, available by <http://www.zib.de/gatermann/symmetry.html>, 1997.
- [9] A. Lari-Lavassani, W.F. Langford, K. Huseyin, and K. Gatermann, *Steady-state mode interactions for D_3 and D_4 -symmetric systems*. Fields Institute, Waterloo, Kanada, Preprint FI-NP 97-009, 1997.
- [10] K. Gatermann, *Computer Algebra methods in symmetric bifurcation theory and equivariant dynamical systems (in Vorbereitung)*.
- [11] A. Brand, T. Wolf, *Examples of the investigation of differential equations with modularized programs*, Mathl. Comput. Modelling 25 (1997), no 8/9, 133–139.

2.2.10 Polyedrische Kombinatorik und Graphentheorie

Verfahren, die auf polyedrischen Methoden beruhen, gehören zu den effizientesten Algorithmen zur Behandlung diskreter Optimierungsprobleme. Daher hat sich die Untersuchung neuartiger mathematischer Strukturen in der Polyedertheorie zu einem eigenständigen Forschungsgebiet entwickelt, siehe Projekte *Polyedertheorie für kombinatorische Optimierungsprobleme* und *Kombinatorische Unterteilungen*. Häufig führt

das Studium kombinatorischer Optimierungsprobleme zu Fragestellungen, die mit Hilfe graphentheoretischer Konzepte formuliert und gelöst werden können. Umgekehrt erlaubt das Studium spezieller Graphenklassen in einigen Fällen Rückschlüsse auf polyedrische Beschreibungen gewisser kombinatorischer Probleme. Das Stabile-Mengen-Problem für perfekte Graphen ist ein solches Beispiel, welches wir in diesem Zusammenhang untersuchen, siehe Projekt *Stabile Mengen und perfekte Graphen*.

Polyedertheorie für kombinatorische Optimierungsprobleme

Bearbeitet von: Norbert Ascheuer, Andreas Bley, Ralf Borndörfer, Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel, Nicola Kamin, Andreas Löbel, Alexander Martin, Annegret Wagler, Robert Weismantel, Roland Wessäly

Kooperationspartner: Dimitris Alevras (IBM, USA); Carlos E. Ferreira (Univeridade de São Paulo, Brasilien); Mattheo Fischetti (Universität Padua, Italien)

Förderung: DAAD Programm „Projektbezogener Wissenschaftleraustausch mit Brasilien – PROBRAL“; Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Robert Weismantel

Die *polyedrische Untersuchung* ist im Moment der vielversprechendste duale Zugang zu Fragestellungen der *kombinatorischen Optimierung*. Dieser Ansatz erlaubt eine systematische, algorithmische und beweisbar effektive Konstruktion von Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme durch lineare Programme. Solche Relaxierungen führen einerseits zu *unteren Schranken* oder sogar zu approximativen Verfahren, andererseits bilden sie auch die theoretische Grundlage zur Entwicklung von *Schnittebenenverfahren* der ganzzahligen Optimierung, mit denen man heute kombinatorische Optimierungsprobleme der industriellen und mathematischen Praxis *optimal* oder mit *bewiesener Güte* näherungsweise löst.

Das *Vorgehen* bei einer polyedrischen Untersuchung ist das Folgende. Dem kombinatorischen Optimierungsproblem wird ein *Polyeder* zugeordnet: Die konvexe Hülle der Lösungen des Problems. Dieses Polyeder ist nach Darstellungssätzen von Minkowski und Weyl durch eine endliche Menge von linearen *Ungleichungen* beschreibbar. Die einzelnen Ungleichungen sind aber zunächst nicht explizit bekannt. Der Inhalt der polyedrischen Kombinatorik ist, solche Ungleichungen zu *beschreiben* und Methoden zu ihrer *Berechnung*, der sogenannten Separierung, zu entwickeln. Schwerpunkte liegen dabei (i) auf der Bestimmung von in gewissem Sinne bestmöglichen Ungleichungen, die *Facetten* des Polyeders definieren, und (ii) der effizienten Separierung von Ungleichungen in *polynomialer Zeit*.

Bei der *technischen Durchführung* einer solchen Untersuchung studiert man gewöhnlich die *polyedrischen Ausprägungen* von kombinatorischen Eigenschaften des Problems. Alternativ ist die Konstruktion polyedrischer Relaxierungen mit Hilfe von Methoden der algebraischen *Transformation* diskreter Optimierungsprobleme möglich.

Unsere Arbeitsgruppe arbeitet derzeit an polyedrischen Untersuchungen der folgenden

Themen:

- Packen und Überdecken von Mengen [9], [23],
- Rucksackprobleme und Erweiterungen [16, 17],
- Graphenpartitionierung und Erweiterungen [4, 5], [6, 7],
- Netzwerkdesign [1, 2], [14],
- On- und Off-line Routenplanung [3], [13],
- Mehrgüterflüsse [15],
- Scheduling,
- Transformationstechniken [9, 8].

Die dabei erzielten Ergebnisse setzen wir um bei der Entwicklung von Schnitt-ebenenverfahren zur Lösung von Anwendungsproblemen aus Projekten mit Koopera-tionspartnern in Industrie und Wirtschaft: Packen und Überdecken von Mengen ver-wenden wir bei der Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport, Rucksackpro-bleme in der allgemeinen ganzzahligen Programmierung, Graphenpartitionierung bei der Frequenzplanung im Mobilfunk, Netzwerkdesign in mehreren Projekten zur Fest-netzplanung, On- und Off-line Routenplanung zur Steuerung des Materialflusses in fle-xiblen Fertigungssystemen, Mehrgüterflüsse zur Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV, und Scheduling zur Auswahl von Frequenzbändern in Hochfrequenzfunknetzen.

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Annegret Wagler

Kooperationspartner: Stefan Hougardy (Humboldt–Universität zu Berlin); Zsolt Tuza (Ungarische Akademie der Wissenschaften)

Förderung: Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel

Das Stabile-Mengen-Problem ist eines der kombinatorischen Optimierungsprobleme an der Schnittstelle zwischen Graphentheorie, Ganzzahliger Optimierung und Komple-xitätstheorie. Die Bestimmung der Stabilitätszahl eines Graphen findet häufig als Mo-dell für ganzzahlige Optimierungsprobleme Anwendung (siehe auch Projekte zur *Fre-quenzzuweisung im Mobilfunk* und zu *Transportproblemen mit und ohne Echtzeitanfor-derungen*). Deshalb ist die Kenntnis von Graphenklassen von Bedeutung, für welche das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar ist.

Grötschel, Lovász und Schrijver bewiesen 1981 die Existenz eines solchen Algorith-mus für perfekte Graphen. Diese Graphenklasse ist polyedertheoretisch dadurch cha-rakterisiert, daß Nicht-Negativitäts- und Cliques-Ungleichungen das zugeordnete Po-lyeder, das sog. Stabile-Mengen-Polytop, beschreiben (siehe *Polyedertheorie für kom-binatorische Optimierungsprobleme*). Damit sind die zur Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops beliebiger Graphen notwendigen Ungleichungen für perfekte Gra-phen auch hinreichend. Trotz dieser bedeutenden Eigenschaft ist die Klasse der per-

perfekten Graphen noch nicht vollständig verstanden, insbesondere ist nicht bekannt, ob die Perfektheit eines Graphen in polynomialer Zeit überprüft werden kann.

Unser Interesse gilt deshalb sowohl der Untersuchung der Struktur perfekter Graphen, als auch der Erweiterung des polyedrischen Verständnisses des Stabile-Mengen-Problems über die Klasse der perfekten Graphen hinaus. Im einzelnen beschäftigen wir uns mit folgenden Fragestellungen:

- Identifikation neuer Klassen perfekter Graphen und Untersuchung der algorithmischen Verifizierbarkeit ihrer Perfektheit [12].
- Untersuchung extremaler Graphen bzgl. verschiedener Klassen perfekter Graphen [21].
- Strukturelle Untersuchungen der Perfektheit in Grenzfallsituationen: Hier verfolgen wir das neue Konzept kritischer Kanten in perfekten Graphen, deren Entfernung zum Verlust der Perfektheit des Graphen führt [22]. Neben dem Auftreten kritischer Kanten in verschiedenen Klassen perfekter Graphen interessiert uns die Charakterisierung sog. kritisch perfekter Graphen, die ausschließlich kritische Kanten besitzen (s. Abb. 2.22).
- Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops allgemeiner Graphen, insbes. imperfekter Graphen an der Grenze zur Perfektheit [23].

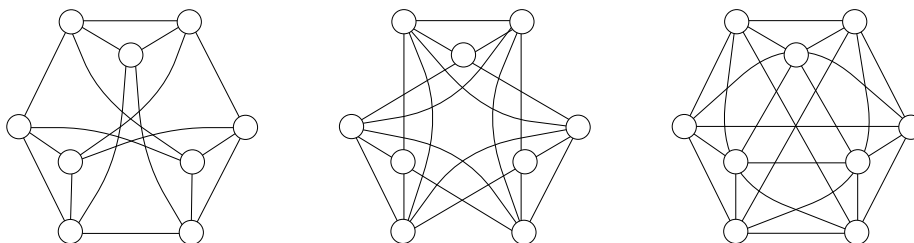


ABBILDUNG 2.22: Beispiele kritisch perfekter Graphen.

Kombinatorische Unterteilungen

Bearbeitet von: Jörg Rambau

Kooperationspartner: Michael Joswig, Günter M. Ziegler (Technische Universität Berlin); Paul Edelman, Victor Reiner (University of Minnesota, USA); Francisco Santos (Universidad de Cantabria, Spanien)

Unterteilungen kombinatorischer Objekte treten in verschiedenen Zusammenhängen auf, von denen die folgenden in diesem Projekt genauer untersucht werden:

Polyedrische Unterteilungen von Punktkonfigurationen sind Zerlegungen der konvexen Hülle einer endlichen Punktmenge im euklidischen Raum in endlich viele Polyto-

pe, deren Ecken in der gegebenen Punktconfiguration liegen. Sind alle Polytope Simplizes, so spricht man von Triangulierungen. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können (s. Abb. 2.23(a)), erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [20]. Elementare Aussagen über die Topologie (z. B. Zusammenhang) und Metrik (z. B. Durchmesser) dieser Räume liefern die theoretischen Grundlagen für Flip-Algorithmen in der Algorithmischen Geometrie.

In diesem Projekt werden die Unterteilungsräume elementarer Punktconfigurationsklassen betrachtet. Die beiden folgenden Hauptresultate konnten bislang erzielt werden: Die Stasheff-Tamari-Halbordnung aller Triangulierungen eines zyklischen Polytopes ist homotopieäquivalent zu einer Sphäre [10, 18]; die Baues-Halbordnung aller polyedrischen Unterteilungen eines zyklischen Polytops ist ebenfalls homotopieäquivalent zu einer Sphäre [19]. Die zyklischen Polytope bilden damit die erste Polytopklasse ohne Beschränkung der Dimension, Kodimension oder Eckenzahl, für die diese Eigenschaften bewiesen werden konnten. Für andere kanonische Beispiele wie Hyperwürfel bleiben die entsprechenden Fragestellungen weiterhin offen.

Zellzerlegungen abstrakter Simplicialkomplexe sind Mengen von Teilkomplexen eines abstrakten Simplicialkomplexes, die eine „fast“ reguläre Zellzerlegung in der geometrischen Realisierung induzieren (s. Abb. 2.23(b)). Weil die Dimensionen der zellulären Randmatrizen häufig wesentlich kleiner sind als die der simplicialen Randmatrizen, kann in diesen Fällen die Berechnung der Homologie des gegebenen Simplicialkomplexes beschleunigt oder erst ermöglicht werden.

In diesem Projekt wird ein Algorithmus entwickelt, der solche Zellstrukturen in einem abstrakten Simplicialkomplex automatisch findet [11].

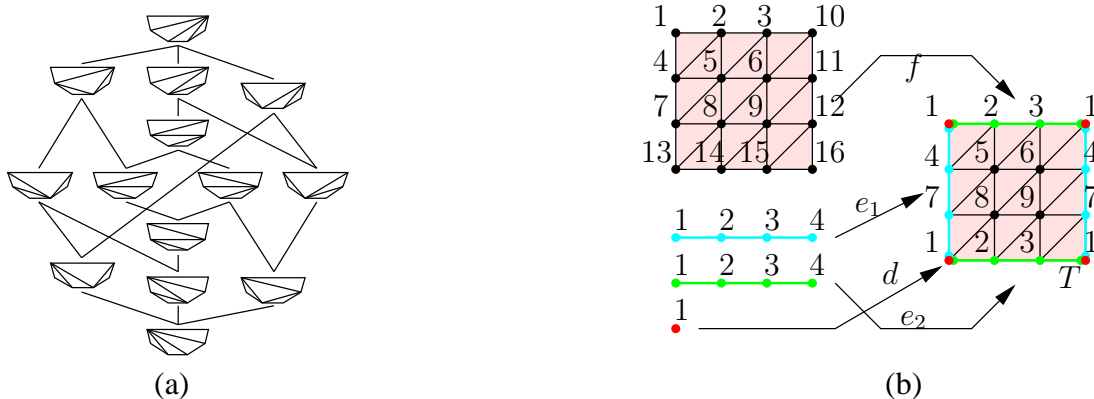


ABBILDUNG 2.23: Die (Tamari-)Halbordnung aller Triangulierungen eines Sechsecks (a); die Standard-Zellzerlegung des Torus, angedeutet durch die charakteristischen Abbildungen d , e_1 , e_2 , f , kann durch Zusammenfassen von Simplizes aus der Standard-Triangulierung gewonnen werden (b).

Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly, *Cost-Efficient Network Synthesis from Leased Lines*, Preprint SC 97–22, ZIB, 1997.
- [2] ———, *Capacity and Survivability Models for Telecommunication Networks*, Preprint SC 97–24, ZIB, 1997.
- [3] N. Ascheuer, M. Fischetti und M. Grötschel, *A polyhedral study of the asymmetric travelling salesman problem with time windows*, Preprint SC 97–11, ZIB, 1997.
- [4] R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin, *Stable-set and other techniques for frequency assignment problems*, Anais da I Oficina Nacional em Problemas de Corte & Empacotamento, Univ. de São Paulo, Instituto de Matemática e Estatística, 1996, 17–21.
- [5] ———, *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*, Preprint SC 97–35, ZIB, 1997.
- [6] R. Borndörfer, C.E. Ferreira und A. Martin, *Decomposing Matrices into Blocks*, Preprint SC 97–15, ZIB, 1997, erscheint in *SIAM J. on Opt.*
- [7] ———, *Matrix Decomposition by Branch-and-Cut*, Preprint SC 97–14, ZIB, 1997.
- [8] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Relations Among Some Combinatorial Programs*, Preprint SC 97–54, ZIB, 1997.
- [9] ———, *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*, Preprint SC 97–30, ZIB, 1997.
- [10] P. Edelman, V. Reiner und J. Rambau, *On subdivision posets of cyclic polytopes*, Preprint 1997-030, MSRI, April 1997.
- [11] M. Joswig und J. Rambau, *Automatic simplification of abstract simplicial complexes*, Manuskript, 1997.
- [12] S. Hougardy, V. Le und A. Wagler, *Wing-triangulated graphs are perfect*, Journal of Graph Theory **24**, No. 1 (1997), 25–31.
- [13] N. Kamin, *On-line optimization of order picking in an automated warehouse*, Dissertation, TU Berlin, 1997.
- [14] T. Koch und A. Martin, *Solving Steiner Tree Problems in Graphs to Optimality*, Preprint SC 96–42, ZIB, 1996.
- [15] A. Löbel, *Optimal vehicle scheduling in public transit*, Dissertation, TU Berlin, 1997.

- [16] A. Martin und R. Weismantel, *Contributions to General Mixed Integer Knapsack Problems*, Preprint SC 97–38, ZIB, 1997.
- [17] _____, *The Intersection of Knapsack Polyhedra and Extensions*, Preprint SC 97–61, ZIB, 1997.
- [18] J. Rambau, *A suspension lemma for bounded posets*, Journal of Combinatorial Theory, Series A **28** (1997), 374–379.
- [19] J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes*, Manuskript, 1997.
- [20] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [21] Z. Tuza und A. Wagler, *Minimally non-preperfect graphs of small maximum degree*, Preprint SC 97–28, ZIB, 1997.
- [22] A. Wagler, *On Critically Perfect Graphs*, Preprint SC 96–50, ZIB, 1997.
- [23] A. Wagler, *Critical Edges in Perfect Graphs and Some Polyhedral Consequences*, Preprint SC 97–46, ZIB, 1997.

2.2.11 Algorithmen zur Lösung allgemeiner ganzzahliger Programme

Ein effizientes Verfahren zur Lösung ganzzahliger linearer Programme in voller Allgemeinheit gibt es, nach derzeitiger wissenschaftlicher Überzeugung, nicht. Dennoch können viele praxisrelevante Probleme im Bereich der kombinatorischen Optimierung mit Schnittebenenverfahren in annehmbarer Zeit gelöst werden. Im ersten Projekt versuchen wir die im rein ganzzahligen Fall gewonnenen Erfahrungen für das Gebiet der gemischt ganzzahligen linearen Programmierung zu nutzen. Enthalten ganzzahlige Programme in ihrer natürlichen Formulierung nichtlineare Anteile in Kostenfunktion oder Nebenbedingungen, so kann die Anwendung nichtlinearer Methoden, wie sie im zweiten Projekt beschrieben werden, von Vorteil sein. Auf diesem Gebiet ist die mathematische Forschung noch in ihren Anfängen, daher steht die Entwicklung grundlegender Optimierungswerkzeuge zur Lösung der nichtlinearen Relaxierungen im Vordergrund.

Schnittebenenverfahren für allgemein gemischt-ganzzahlige Programme

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Alexander Martin, Robert Weismantel

Kooperationspartner: Robert E. Bixby (Rice University, Houston, USA); Carlos E. Ferreira (Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasilien)

Förderung: DAAD Programm „Projektbezogener Wissenschaftlertausch mit Brasilien – PROBRAL“; Center for Research on Parallel Computing (CRPC), Houston, USA

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines Programmpakets zur Lösung allgemein (gemischt) ganzzahliger linearer Programme, das heißt zur Lösung von Problemen der Form $\min \{c^T x : Ax \leq b\}$ mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$ und Variablen x_1, \dots, x_n , die binär, ganzzahlig oder kontinuierlich sein können. Die derzeit erfolgreichste Methode zur Lösung gemischt-ganzzahliger linearer Programme sind LP-basierte Branch-and-Bound Algorithmen, wobei die LP-Relaxierungen möglicherweise durch Schnittebenen verschärft werden. Die drei wesentlichen Komponenten eines solchen Verfahrens sind: (1) Preprocessing inklusive Strukturanalyse, (2) eine effiziente Implementierung des Enumerationsverfahrens und (3) das Studium und Identifizieren gültiger Ungleichungen des zugrundeliegenden Polyeders und deren Separierung. Im Berichtszeitraum haben wir uns in verschiedenen Projekten den Punkten (1) und (3) näher gewidmet.

Dekomposition von Matrizen. Um allgemein ganzzahlige Programme praktischer Größenordnungen lösen zu können, müssen häufig strukturelle Eigenschaften der zugrundeliegenden Nebenbedingungsmatrix erkannt und ausgenutzt werden. Ein klassisches Beispiel hierfür ist die Verwendung von Knapsack-Kenntnissen für lineare 0/1-Programme. In diesem Forschungsvorhaben erweitern wir diesen Gedanken und untersuchen Matrizen mit Blockstruktur. Dabei geht es um die Frage, wie man eine gegebene Matrix in eine gegebene Anzahl von Blöcken (Mengen von Zeilen) dekomponiert, so daß jede Zeile in höchstens einem Block enthalten ist, kein Block mehr als eine gegebene Anzahl von Zeilen enthält und zwei Zeilen in verschiedenen Blöcken sich in keiner Spalte schneiden. Ziel ist es, die Anzahl der Zeilen, die keinem Block zugewiesen werden können, zu minimieren. Eine (optimale) Blockdekomposition kann beispielsweise genutzt werden, um Multiple-Knapsack Relaxierungen des zugrundeliegenden Problems zu bestimmen und um Kenntnisse für dieses Problem in Form von Ungleichungen dazu zu verwenden, die LP-Relaxierung des ganzzahligen Programms zu verschärfen, siehe auch Unterpunkt (*Gemischt*) *Ganzzahlige Schnittebenen*.

Zur Lösung wurde das Matrixdekompositions-Problem, einem polyedrischen Ansatz folgend, als ganzzahliges Programm formuliert und die darauf basierende LP-Relaxierung durch einige neue Ungleichungen verschärft (unter Verwendung von sogenannten *Cover-, Kreis- und Cliques-Ungleichungen*). Diese Ungleichungen dienen als Basis eines Schnittebenenalgorithmus. Unsere Implementierung wurde an verschiedenen Beispielen der MIPLIB getestet, für Beispiele bis zu mittlerer Größenordnung sind die Optimallösungen in vernünftiger Zeit bestimmbar [1].

(Gemischt) Ganzzahlige Schnittebenen. Schnittebenen für ganzzahlige Programme lassen sich in zwei Gruppen einteilen, je nachdem, ob bei ihrer Herleitung strukturelle Eigenschaften der zugrundeliegenden Matrix ausgenutzt werden oder nicht. Beispiele für Familien von Schnittebenen, die keine Kenntnisse über die Struktur der Matrix benötigen, sind *Chvátal-Gomory- oder Lift-und-Project-Ungleichungen*. Ein alternativer Ansatz besteht darin, Relaxierungen des zugrundeliegenden Problems zu betrachten und Ungleichungen für diese Relaxierungen abzuleiten. Beispiele hierfür sind 0/1-Knapsack-, Set-Packing- oder auch spezielle gemischt ganzzahlige Relaxierungen.

Dieser zweite Ansatz wurde in zwei weiteren Teilprojekten untersucht. Betrachtet wurden zunächst Probleme der Form $\max\{c^T x + d^T y : a^T x + b^T y \leq \alpha, x \in \mathbb{Z}^n, y \in \mathbb{R}^q, 0 \leq \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \leq u\}$. Für diesen Problemtyp bestimmten wir eine neue Klasse von Ungleichungen, die sogenannten *Mixed-Integer-Weight-Ungleichungen*. Wir konnten zeigen, daß sie unter bestimmten Voraussetzungen Facetten definieren sowie eine vollständige Beschreibung des zugrundeliegenden Polyeders liefern. Die Ungleichungen wurden in das Programmpaket SIP eingebaut, das von uns derzeit zur Lösung allgemein gemischt ganzzahliger Programme entwickelt wird. Es zeigte sich, daß unter Verwendung dieser Ungleichungen für einige praktische Probleme aus der MIPLIB beachtliche Laufzeitverbesserungen erzielt werden konnten [7].

Im zweiten Teilprojekt werden Polyeder untersucht, die sich als Durchschnitt mehrerer Knapsack-Polyeder formulieren lassen, das heißt Polyeder der Form $P = \text{conv}\{x \in \mathbb{Z}^n : Ax \leq b, 0 \leq x \leq u\}$, wobei $A \in \mathbb{Z}^{m \times n}$, $m \geq 2$. Auch hier ist es uns gelungen, eine neue Klasse von Ungleichungen, sogenannte *Feasible-Set-Ungleichungen*, zu finden. Interessant in diesem Zusammenhang ist die Frage, wann die Ungleichungen der einzelnen Knapsack-Polyeder ausreichen, um P vollständig zu beschreiben. Wir konnten dazu hinreichende Bedingungen angeben. Für den Fall, daß diese Bedingungen nicht greifen, haben wir das Prinzip des Verschmelzens (engl. *melting*) entwickelt, das aus zwei Ungleichungen, die gültig für die einzelnen Knapsack-Polyeder sind, durch Verschmelzen einiger Koeffizienten, gültige Ungleichungen für P erzeugt.

Die Separierung von *Feasible-Set-Ungleichungen* erweist sich als nicht-triviale Aufgabe. Um die auftretenden Laufzeiten in Grenzen zu halten, müssen zunächst geeignete Unterstrukturen ausfindig gemacht werden (siehe dazu obiges Projekt *Dekomposition von Matrizen*). Auf diesen Unterstrukturen wird versucht, durch (optimales) Lösen geeigneter kleiner ganzzahliger Programme *Feasible-Set-Ungleichungen* zu finden. Erste Ergebnisse zeigen, daß dieser Weg erfolgversprechend ist [8].

Nichtlineare Methoden in der kombinatorischen Optimierung

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

Kooperationspartner: Krzysztof C. Kiwiel (Polish Academy of Sciences, Warschau, Polen); Franz Rendl (Technische Universität Graz, Österreich)

Im Vergleich zur Linearen Programmierung bieten nichtlineare Ansätze größere Möglichkeiten zum Entwurf von Relaxierungen kombinatorischer Optimierungspro-

bleme. Die Lösung derartiger Relaxierungen erfordert aber meist den Einsatz wesentlich aufwendigerer Verfahren. Während zum Studium des Potentials und der Qualität einer nichtlinearen Relaxierung die Verwendung eines exakten, wenn auch rechenintensiven Algorithmus angebracht scheint, ist für die Praxis eine Methode, die angenäherte Lösungen in vertretbarer Zeit liefert, von Bedeutung. In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit beiden Aspekten, der Qualität der Relaxierungen und der effizienten Berechenbarkeit, im Bereich der semidefiniten Programmierung.

Semidefinite Relaxierungen

Semidefinite Programme verallgemeinern lineare Programme, indem auch positiv semidefinite Matrixvariablen zugelassen werden. Viele Partitions- und Färbungsprobleme sowie quadratische 0/1-Programme mit Nebenbedingungen können äquivalent als lineare Programme über positiv semidefiniten Matrizen mit beschränktem Rang dargestellt werden. Läßt man die Rangbedingung fallen, erhält man eine semidefinite Relaxierung. Mit der Modellierung guter Anfangsrelaxierungen und deren Verbesserung durch geeignete Schnittebenen haben wir uns bereits in früheren Arbeiten befaßt [3, 6]. Zur exakten Berechnung semidefiniter Relaxierungen verwenden wir den Inneren-Punkte-Algorithmus aus [5].

Da der Aufwand zur Lösung semidefiniter Programme stark mit der Ordnung der Matrixvariablen wächst, gewinnt für Branch-and-Bound-Verfahren die Frage an Bedeutung, ob anhand der Dualvariablen frühzeitig Variablen fixiert werden können. Das aus der linearen Programmierung bekannte Verfahren der reduzierten Kostenfixierung ist nicht unmittelbar anwendbar, da die entsprechenden Ungleichungen in der semidefiniten Relaxierung oft nicht explizit enthalten sind. In [2] entwickeln wir ein neues Verfahren zur Fixierung von Variablen für eine Klasse von semidefiniten Programmen, zu der auch die kanonische MAX-CUT-Relaxierung gehört. Mittels einer Transformation, die Dualvariablen und Struktureigenschaften erhält, läßt sich dieses Verfahren auch auf semidefinite Relaxierungen quadratischer 0/1-Probleme anwenden.

Spektrale Bündelverfahren

Primal-Duale Innere-Punkte-Verfahren erlauben zwar, semidefinite Programme in polynomialer Zeit numerisch stabil zu lösen, sind aber zur Berechnung semidefiniter Relaxierungen von Problemen praktisch interessanter Größenordnungen ungeeignet, da sie nur geringe Möglichkeiten bieten, Struktureigenschaften von Kosten- und Nebenbedingungsmatrizen auszunutzen. Deshalb wurde von uns ein Spektrales Bündelverfahren entwickelt, das rasch gute Näherungslösungen bestimmt [4].

Der Ansatz beruht auf der Beobachtung, daß sich die meisten semidefiniten Relaxierungen kombinatorischer Probleme äquivalent als extremale Eigenwertoptimierungsaufgaben darstellen lassen. Eigenwertprobleme sind nichtglatte konvexe Optimierungsaufgaben, die mit Subgradientenverfahren gelöst werden können. Subgradienten bestimmen sich aus den Eigenvektoren zu den extremalen Eigenwerten. Die zur Berechnung der Eigenvektoren eingesetzten Lanczos-Algorithmen erlauben es, die Struktur des Problems auszunutzen. Ähnlich dem traditionellen Bündelansatz formt sich das

Verfahren aus der Subgradienteninformation ein Schnittebenenmodell, das nun aber durch ein nichtpolyedrisches semidefinites Programm beschrieben wird. Die Verwendung eines aggregierten Subgradienten ermöglicht es, die Größe dieses Modells beliebig zu steuern, so daß der Aufwand zwischen Eigenwert- und Modellberechnung balanciert werden kann.

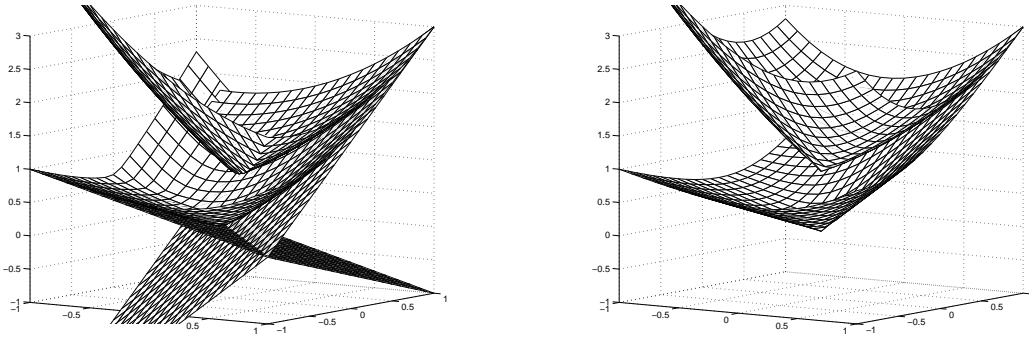


ABBILDUNG 2.24: Das linke Bild zeigt eine Eigenwertfunktion mit zwei von Subgradienten definierten Schnittebenen sowie das aus dem polyedrischen Schnittebenenmodell erzeugte quadratische Modell der Funktion um den Punkt $(1,1)$. Das rechte Bild stellt das aus den gleichen Subgradienten erzeugte semidefinite Schnittebenenmodell sowie das entsprechende quadratische Modell um den Punkt $(1,1)$ dar.

Eine kanonische Einbindung von Ungleichungsnebenbedingungen in das in [4] entwickelte Verfahren führt zu inakzeptablen Laufzeitsteigerungen. Wir arbeiten daher an einer Erweiterung, in der Ungleichungen ohne nennenswerte Laufzeitverlängerung behandelt werden können. Damit sind auch Schnittebenenverfahren mit diesem Algorithmus realisierbar.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, C.E. Ferreira und A. Martin, *Decomposing Matrices into Blocks*, Preprint SC 97–15, ZIB, 1997, erscheint in SIAM J. Optim.
- [2] Ch. Helmberg, *Fixing variables in semidefinite relaxations*, Algorithms – ESA’97 (Rainer Burkard und Gerhard Woeginger, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science **1284**, Springer, 1997, 259–270.
- [3] Ch. Helmberg und F. Rendl, *Solving Quadratic $(0,1)$ –Problems by Semidefinite Programs and Cutting Planes*, Preprint SC 95–35, ZIB, 1995, erscheint in Math. Programming.
- [4] _____, *A Spectral Bundle Method for Semidefinite Programming*, Preprint SC 97–37, ZIB, 1997, überarbeitet Oktober 1997.

- [5] Ch. Helmberg, F. Rendl, R. J. Vanderbei und H. Wolkowicz, *An interior–point method for semidefinite programming*, SIAM J. Optim. **6** (1996), Nr. 2, 342–361.
- [6] Ch. Helmberg, F. Rendl und R. Weismantel, *Quadratic knapsack relaxations using cutting planes and semidefinite programming*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (W. H. Cunningham, S. T. McCormick, und M. Queyranne, eds.), Lecture Notes in Computer Science **1084**, Springer, 1996, 175–189.
- [7] A. Martin und R. Weismantel, *Contributions to General Mixed Integer Knapsack Problems*, Preprint SC 97–38, ZIB, 1997.
- [8] ———, *The Intersection of Knapsack Polyhedra and Extensions*, Preprint SC 97–61, ZIB, 1997.

2.2.12 Zahlentheoretische und geometrische Methoden

Methoden zur Lösung von Fragestellungen und Problemen aus der Ganzzahligen Optimierung haben ihren Ursprung in verschiedenen mathematischen Disziplinen, wie etwa *Geometrie der Zahlen*, *Konvexgeometrie*, *Algebra* oder *Zahlentheorie*. Der Grund dafür ist, daß in all diesen Gebieten das Studium der Beziehungen zwischen diskreten Strukturen (Gitter) und kontinuierlichen Mengen (konvexe Körper, Kegel) von fundamentaler Bedeutung ist.

Ziel dieses Grundlagenprojekts ist es, neuere Methoden und Resultate aus den genannten Gebieten für die Ganzzahlige Optimierung nutzbar zu machen und zum besseren Verständnis von Gitterstrukturen im Zusammenhang mit konvexen Mengen beizutragen. Die einzelnen Projekte lassen sich den folgenden Themenkreisen zuordnen:

- Geometrie der Zahlen
- Nicht-diskrepante Auflösungen torischer Singularitäten
- Testmengen in der Ganzzahligen Optimierung
- Packungen und Überdeckungen konvexer Körper

Geometrie der Zahlen

Bearbeitet von: Robert T. Firla, Martin Henk, Bianca Spille, Robert Weismantel

Kooperationspartner: Ulrich Betke (Universität Siegen); Günter M. Ziegler (Technische Universität Berlin)

Förderung: Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Robert Weismantel; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Günter M. Ziegler

Durch das Lösen zahlentheoretischer Fragestellungen mittels geometrischer Betrachtungen und Methoden begründete Minkowski 1896 das Gebiet *Geometrie der Zahlen*.

Heutzutage ist es ein unabhängiges Forschungsgebiet mit engen Verflechtungen zu diversen anderen Disziplinen der Mathematik, wie z.B. Kodierungstheorie und Ganzzahlige Optimierung.

Algorithmische Aspekte. Eines der zentralen Probleme in der Geometrie der Zahlen ist die Bestimmung der Dichte δ einer dichtesten gitterförmigen Packung von Kugeln bzw. die Konstruktion von möglichst dichten Packungen. Die besten Packungen kennt man nur in den Dimensionen ≤ 8 , und schon Minkowski hat gezeigt, daß im d -dimensionalen euklidischen Raum Gitterpackungen existieren mit $\frac{1}{d} \log_2 \delta > -1$. Dennoch sind bis heute keine allgemeingültigen (expliziten) Konstruktionen von Gitterpackungen bekannt, die diese Schranke erreichen.

Basierend auf [11] haben wir ein Verfahren entwickelt [12], welches durch sukzessives Verfeinern eines *beliebigen* Packungsgitters stets eine Gitterpackung findet mit $\frac{1}{d} \log_2 \delta > -1.2$. Eine *ad hoc* Implementation dieser Konstruktionsvorschrift liefert in einigen Dimensionen, z.B. für $d = 4, 7, 8, 16, 17, 20, 23$, Gitterpackungen, die mit den besten, bisher bekannten übereinstimmen. Wir halten das Potential dieses Verfahrens, sowohl vom theoretischen wie auch vom algorithmischen Standpunkt aus, für noch nicht ausgeschöpft, und es gilt nun, den Algorithmus genau zu analysieren.

Die dichtesten Gitterpackungen von 3-dimensionalen Polytopen sind nur in einigen wenigen Fällen bekannt. Jedoch läßt sich dieses Problem „im wesentlichen“ auf ein nicht-lineares Optimierungsproblem mit endlich vielen linearen Restriktionen zurückführen. Unser Ziel ist es, einen Algorithmus zur Bestimmung einer dichtesten Gitterpackung 3-dimensionaler Polytope zu entwickeln.

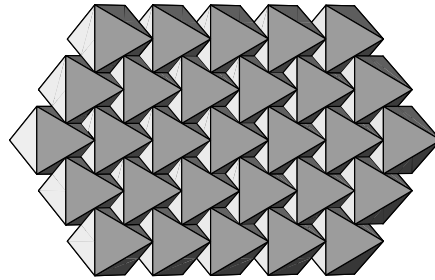


ABBILDUNG 2.25: Dichteste Gitterpackung von Oktaedern (Minkowski, 1896).

Hilbert Basen. Die Geometrie von minimalen Erzeugendensystemen (Hilbert Basen) rationaler (spitzer) Kegel ist bisher nur unzureichend verstanden, obwohl die Berechnung solcher Basen von zentraler Bedeutung für Testmengen-Algorithmen in der ganzzahligen linearen Optimierung ist. In [14, 15] setzen wir unsere in [13] begonnenen Untersuchungen der geometrischen und algorithmischen Struktur von Hilbert Basen fort und zeigen u.a., daß Hilbert Basen eng verbunden sind mit linearen Diophantischen

Approximationsproblemen rationaler Vektoren. Desweiteren verallgemeinern wir Ungleichungen von Lambert und Diaconis, Graham & Sturmfels für Hilbert Basen von Knapsack-Kegeln. Es bleibt aber noch viel Grundlagenarbeit zu leisten. Einerseits sind wir daran interessiert, für spezielle Kegel, die zu gewissen Optimierungsproblemen korrespondieren, möglichst gute Algorithmen zur Berechnung der Hilbert Basis zu finden. Andererseits suchen wir nach geometrischen Eigenschaften, die diese Basen charakterisieren. So wird z.B. vermutet, daß Hilbert Basen die Carathéodory Eigenschaft besitzen, d.h. jeder ganzzahlige Punkt in einem d -dimensionalen Kegel kann als nicht negative ganzzahlige Linearkombination von höchstens d Elementen der Hilbert Basis dargestellt werden. Bisher ist diese Vermutung nur in Dimensionen $d \leq 3$ bewiesen. Für spezielle Klassen von Kegeln konnten wir diese Vermutung verifizieren [15], aber in [9] wird u.a. gezeigt, daß eine eng damit verbundene Vermutung – binary covering – falsch ist in Dimensionen $d \geq 4$.

Nicht-diskrepante Auflösungen torischer Singularitäten

Bearbeitet von: Utz-Uwe Haus, Martin Henk

Kooperationspartner: Dimitrios I. Dais (Universität Tübingen); Günter M. Ziegler (Technische Universität Berlin)

Förderung: Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Günter M. Ziegler

Die Existenz von „schönen“ Auflösungen gewisser torischer Singularitäten ist äquivalent zur Existenz von „schönen“ Gittertriangulierungen eines der Singularität zugeordneten Kegels. Eine entscheidende Rolle hierbei spielen u.a. Hilbert Basen von Kegeln. Wir untersuchen in diesem Projekt „schöne“ (nicht-diskrepante, projektive) Auflösungen von Gorensteinschen abelschen Quotientensingularitäten, d.h., wir studieren den Quotientenraum \mathbb{C}^r/G , wobei G eine endliche abelsche Untergruppe von $SL(r, \mathbb{C})$ ist.

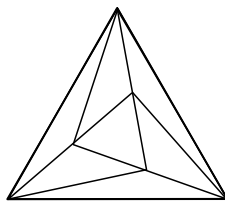


ABBILDUNG 2.26: Nicht-diskrepante, projektive Auflösung von \mathbb{C}^3/G für $G = \langle \text{diag}(e^{2\pi i/7}, e^{4\pi i/7}, e^{8\pi i/7}) \rangle$.

Für $r \geq 4$ läßt \mathbb{C}^r/G im allgemeinen keine „schönen“ Auflösungen zu. Ist aber \mathbb{C}^r/G einbettbar als vollständiger Durchschnitt von Hyperflächen in einem affinen komplexen Raum, so können wir für diese Klasse von Singularitäten zeigen, daß solche Auflösungen *in allen Dimensionen* existieren [8]. Diese Untersuchungen möchten

wir ausweiten auf torische Singularitäten, die nicht notwendigerweise als Quotientensingularitäten darstellbar sind.

Weiterhin konnten wir für 1-parametrische zyklische Untergruppen G beweisen, daß \mathbb{C}^r/G nur dann “schön” desingularisiert werden kann, wenn für die Ordnung l der Gruppe gilt: $l \equiv 0 \pmod{r-1}$ oder $l \equiv 1 \pmod{r-1}$ [7]. Eine Verallgemeinerung auf 2-parametrische zyklische Untergruppen erwies sich als wesentlich schwieriger, aber auch hier gelang es uns, eine notwendige und hinreichende Bedingung anzugeben [6].

Testmengen in der Ganzzahligen Optimierung

Bearbeitet von: Robert Firla, Martin Henk, Alexander Martin, Bianca Spille, Regina Urbaniak, Robert Weismantel

Kooperationspartner: Gerard P. Cornuejols (Cornell University, USA); Rehka Thomas (Texas A & M University, USA); Laurence Wolsey (CORE, Belgien); Andreas S. Schulz (Technische Universität Berlin)

Förderung: Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Robert Weismantel; DFG-Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“

Ganzzahlige Optimierung kann geometrisch auf die Berechnung *kurzer* Basen eines Gitters oder die Konstruktion eines Erzeugendensystems (*Hilbert Basis*) für die ganzzahligen Punkte in einem Kegel reduziert werden. Zur Lösung solcher Problemstellungen gibt es grundlegende Verfahren: einerseits Gitterreduktionsmethoden, andererseits Verfahren, die Testmengen für ganzzahlige Programme konstruieren.

Eine Testmenge eines ganzzahligen Programms ist eine endliche Menge von Vektoren, so daß jeder nicht optimale, zulässige Punkt des Programms durch Addition eines Elements aus der Testmenge verbessert werden kann. In der Literatur sind mehrere Arten von Testmengen bekannt, die unter anderem davon abhängen, in welcher Form das Ausgangsproblem gegeben ist. Zu erwähnen sind an dieser Stelle die Graver-Testmenge, Nachbarschaftssysteme und die reduzierte Gröbner-Basis. In den letzten Jahren gab es eine Reihe von Ergebnissen, die aufzeigen, daß das Studium von Testmengen ein vielversprechendes Forschungsthema darstellt.

Testmengen für ganzzahlige Programme definieren Erzeugendensysteme für die ganzzahligen Punkte in gewissen Kegeln. Diese Erzeugendensysteme spielen eine wichtige Rolle in verschiedenen Gebieten der Algebra, der Zahlentheorie, der Kombinatorik und der Geometrie. Beispielsweise konnte in [17] ein Zusammenhang aufgezeigt werden zwischen kurzen Vektoren in Gittern, zwischen dem gruppentheoretischen Ansatz in der Ganzzahligen Optimierung und dem Studium von Testmengen. Ferner lassen sich Verfahren zur Berechnung von Testmengen algebraisch interpretieren. So führte eine algebraische Interpretation des Verfahrens in [20] zu dem Begriff eines abgeschnittenen Ideals, welcher in [19] eingeführt wurde.

In [10, 16] konnte gezeigt werden, daß für 0/1-Programme das Problem, einen augmentierenden Vektor zu finden, nicht schwerer ist als das Problem, eine optimale

Lösung des Programms zu konstruieren. Dieses Resultat rechtfertigt im Sinne der Komplexitätstheorie den „Testmengen“-Ansatz für 0/1-Programme. Wir versuchen gegenwärtig, dieses Resultat auf beliebige ganzzahlige Programme zu verallgemeinern. Die bisher bekannten Algorithmen zur Berechnung einer Testmenge sind nicht geeignet zur Behandlung von großen Problemen. Ein Ansatz, um in dieser Richtung Fortschritte zu erzielen, besteht in der Verwendung von Dekompositionsmethoden für ganzzahlige Programme. Solche Dekompositionsmethoden in Verbindung mit Verfahren zur Skalierung von Daten und der impliziten Behandlung von Teilen einer Testmenge ergeben für eine Reihe von ganzzahligen Programmen erhebliche Verbesserungen. Ferner ermöglichen solche Ideen, gute und schnelle Heuristiken für die Ganzzahlige Optimierung zu entwerfen, siehe [5].

Ein Schwerpunkt künftiger Arbeiten wird darauf gelegt, für bestimmte diskrete Optimierungsprobleme polynomiale Augmentierungsalgorithmen zu entwerfen, welche auf dem Studium von Testmengen beruhen. Erste Untersuchungen in diese Richtung finden sich in [18], [14].

Packungen und Überdeckungen konvexer Körper

Bearbeitet von: Martin Henk

Kooperationspartner: Ulrich Betke und Jörg M. Wills (Universität Siegen)

Förderung: Leibniz-Preis der DFG, verliehen an Martin Grötschel

In [2, 3] beschreiben wir einen neuen Zugang zu den klassischen Problemen endlicher und unendlicher (Gitter-)Packungen und (Gitter-)Überdeckungen von Translaten konvexer Körper. Dieser neue Ansatz beruht auf der Einführung von parametrischen Dichten, die eine Fülle von interessanten Eigenschaften und Anwendungen besitzen. So konnte unter Verwendung dieser Dichten die „Wurstvermutung“ von L. Fejes Tóth in Dimensionen ≥ 42 bestätigt werden [1].

Basierend auf den parametrischen Dichten konnte eine einheitliche Theorie für endliche und unendliche Packungs- oder Überdeckungsprobleme entwickelt werden. Diese Theorie ermöglicht es nun, z.B. die Dichte einer dichtesten unendlichen (Gitter-)Packung mittels der parametrischen Dichten endlicher (Gitter-)Packungen abzuschätzen. An einer umfassenden Monographie über diese Zusammenhänge wird zur Zeit gearbeitet.

Die parametrische Dichte liefert auch mathematisch elegante Modelle zur Beschreibung von Kristallwachstum, die physikalisch gleichwertig sind zu den klassischen Modellen von Gibbs-Curie-Wulff und Kossel-Stranski. Bei kleinen Kugel- (Atom-) Zahlen haben Physiker und Kristallographen mit aufwendigen Computerprogrammen die optimalen Cluster-Packungen von bis zu 1000 Kugeln bestimmt. Diese Cluster sind für die moderne Physik und Technik interessant, und die Dichte wird nach dem Lennard-Jones-Potential bestimmt. Mit einem anderen Potential haben Conway et al. (optimale) Cluster bestimmt, die in der Kodierungstheorie eine Rolle spielen [4]. Erste Stichproben bei der parametrischen Dichte deuten auf Übereinstimmung mit den optimalen

Clustern bzgl. des Lennard-Jones-Potentials hin [21]. Unser gegenwärtiges Interesse gilt hier einer computergestützten systematischen Untersuchung der optimalen Cluster bzgl. der parametrischen Dichte.

Publikationen

- [1] U. Betke und M. Henk, *Finite packings of spheres*, Preprint 465/1995, TU Berlin 1995, erscheint in *Discrete Comput. Geom.*
- [2] U. Betke, M. Henk und J.M. Wills, *Finite and infinite packings*, *J. reine angew. Math.* **453** (1994), 165–191.
- [3] ———, *A new approach to covering*, *Mathematika* **42** (1995), 251–263.
- [4] J.H. Conway, T.D.S. Duff, R.H. Hardin und N.J.A. Sloane, *Minimal energy clusters of hard spheres*, *Discrete Comput. Geom.* **14** (1995), 237–260.
- [5] G. Cornuejols, R. Urbaniak, R. Weismantel und L. Wolsey, *Decomposition of integer programs and of generating sets*, *Lecture Notes in Computer Science* **1284**, *Algorithms -ESA'97*, R. Burkard and G. Woeginger Hrsg., Springer, 1997, 92–104.
- [6] D.I. Dais, U.-U. Haus und M. Henk, *On Gorenstein cyclic quotient singularities*, in Vorbereitung.
- [7] D.I. Dais und M. Henk, *On a series of Gorenstein cyclic quotient singularities admitting a unique projective crepant resolution*, Preprint SC 97–39, ZIB, 1997.
- [8] D.I. Dais, M. Henk und G.M. Ziegler, *All Abelian Quotient C.I.-Singularities Admit Projective Crepant Resolutions in All Dimensions*, Preprint SC 97–01, ZIB, 1997, (alg-geom/9704007).
- [9] R.T. Firla und G.M. Ziegler, *Hilbert bases, unimodular triangulations, and binary covers of rational polyhedral cones*, Preprint TU Berlin, 1997, erscheint in *Discrete Comput. Geom.*
- [10] M. Grötschel und L. Lovász, *Combinatorial optimization*, *Handbook of Combinatorics*, chapter **28**, Graham et al. eds., Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1995.
- [11] M. Henk, *Finite and infinite packings*, Habilitationsschrift, Universität-GH Siegen, 1995.
- [12] ———, *Finite lattice packings*, in Vorbereitung.
- [13] M. Henk und R. Weismantel, *On Hilbert bases of polyhedral cones*, SC 96–12, ZIB, 1996, erscheint in *Results in Mathematics*.

- [14] ———, *Test sets of the knapsack problem and simultaneous diophantine approximation*, Lecture Notes in Computer Science **1284**, Algorithms -ESA'97, R. Burkard and G. Woeginger Hrsg., Springer, 1997, 271–284.
- [15] ———, *Hilbert bases of cones related to simultaneous Diophantine approximations and linear Diophantine equations*, Preprint SC 97–29, ZIB, 1997.
- [16] A.S. Schulz, R. Weismantel und G.M. Ziegler, *0/1 integer programming: optimization and augmentation are equivalent*, Lecture Notes in Computer Science **979**, Algorithms-ESA'95, P. Spirakis Hrsg., Springer, 1995.
- [17] B. Sturmfels, R. Weismantel und G.M. Ziegler, *Gröbner bases of lattices, corner polyhedra and integer programming*, Beiträge zur Geometrie und Algebra **36** (1995), 281–298.
- [18] R. Thomas und R. Weismantel, *Test sets and inequalities*, Lecture Notes in Computer Science **1084**, Integer programming and combinatorial optimization, W. H. Cunningham et al. eds., Springer (1996).
- [19] R. Thomas und R. Weismantel, *Truncated Gröbner bases for integer programming*, Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing, Vol. 8, No. 4 (1997), 241–257.
- [20] R. Urbaniak, R. Weismantel und G.M. Ziegler, *A variant of the Buchberger algorithm for integer programming*, SIAM Journal on Discrete Mathematics, Vol. 1, No. 10 (1997), 96–108.
- [21] J.M. Wills, *Lattice packings of spheres and the Wulff-shape*, Mathematika **86** (1996), 229–236.

2.2.13 Transportprobleme mit und ohne Echtzeitanforderungen

Fragen der Lösung von *Transportproblemen* —historisch eines der wichtigsten Anwendungsfelder der Optimierung und des Operations Research [6]— stellen sich heute mit großer Brisanz: Die Bahnreform ist bereits ebenso Wirklichkeit wie die Deregulierung des Luftverkehrs in der Europäischen Union — eine Maßnahme, die im *gesamten Sektor* des öffentlichen Personennahverkehrs (ÖPNV) für 1999 unmittelbar bevorsteht. Die Notwendigkeit einer computergesteuerten Planung und Steuerung logistischer Systeme liegt auf der Hand, und es ist schwer vorstellbar, wie dies ohne mathematische *Optimierungstechniken* der neuesten Art effizient und kostengünstig funktionieren sollte.

Zwei wichtige Kennzeichen realer Transportprobleme sind deren *Vielschichtigkeit* und der *Echtzeitaspekt*, die sich am besten an zwei typischen *Beispielen* aufzeigen lassen.

Beispiel 1 ist die operative Planung eines Nahverkehrsunternehmens einer Großstadt: Ein einziges gigantisches Optimierungsproblem der Linienplanung, Fahrplanerstellung, Fahrzeugumlaufplanung, Dienstplanung und Personaleinsatzplanung! Fragen dieser *Komplexität* lassen sich im Moment weder mit mathematischen noch mit anderen Methoden im Ganzen lösen, und man führt eine hierarchische Planung in aufeinanderfolgenden Stufen durch. Und jedes dieser Einzelprobleme für sich liegt bereits an der Grenze des heute Machbaren: Neben der reinen *Größe* sind komplizierte technische und arbeitsrechtliche Bedingungen eine planerische Herausforderung.

Beispiel 2 ist die Steuerung des Materialflusses in einem flexiblen Fertigungssystem. Hier tritt ganz deutlich ein weiterer Aspekt auf: Störungen, unvorhersehbare Generierung und Stornierung von Aufträgen, etc. führen zu dauernden wesentlichen *Änderungen* des Zustands des Systems, und darauf muß in Echtzeit reagiert werden.

Unser *Ziel* in den Projekten dieses Schwerpunktes ist, komplexe reale Transportprobleme zu modellieren, zu simulieren und mathematische Methoden zu ihrer Lösung zu entwickeln. Im *Off-Line*-Fall mit vollständigen Daten (wie im ÖPNV) heißt das, in vertretbarer Rechenzeit optimale oder wenigstens Lösungen mit beweisbarer Güte zu finden. Für *On-Line*-Probleme ist die Frage der Bewertung der Lösungsqualität selbst bereits Gegenstand der Forschung und wir versuchen, durch Simulation von Echtzeitsystemen sinnvolle Kriterien zu identifizieren und damit praktikable Verfahren zu entwickeln. In beiden Fällen führt die Unteilbarkeit von Gütern und/oder Transportmitteln zur Verwendung von *Methoden* der ganzzahligen Programmierung.

Wir untersuchen derzeit folgende Fragestellungen: Im Off-Line Bereich arbeiten wir an zwei Problemen der operativen Planung im ÖPNV, der *Fahrzeugumlaufplanung* und der darauffolgenden *Dienstplanung*, sowie an der ergänzenden *Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport*. Im On-Line Bereich befassen wir uns in mehreren Projekten mit der *Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme* in flexiblen Fertigungssystemen.

Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Andreas Löbel

Kooperationspartner: Berliner Verkehrsbetriebe — BVG; HanseCom GmbH (Hamburg); Gesellschaft für Informatik, Verkehrs- und Umweltplanung GmbH — IVU (Berlin)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie

Bei der *Fahrzeugumlaufplanung* im ÖPNV geht es darum, eine vorgegebene Menge von Fahrgastfahrten eines bereits festgelegten Fahrplans so zu Umläufen zu verketteten, daß diese Umläufe mit einer Minimalanzahl an Fahrzeugen abgefahren werden können. Neben der Minimierung der Fixkosten für die Fahrzeugflotte wird dabei zweitrangig auch eine Verminderung der operativen Kosten angestrebt. Die Umlaufplanungsprobleme unserer Kooperationspartner, der Verkehrsbetriebe von Berlin (BVG) und Ham-

burg (HHA und VHH), sind von enormer Größe: Bis zu 14 Betriebshöfe mit 10 verschiedenen Fahrzeugtypen bedienen mehr als 25.000 Fahrgastfahrten! Die Anzahl der Kombinationsmöglichkeiten von Fahrgastfahrten ist mit bis zu 70.000.000 enorm.

Trotzdem können diese Probleme mit *mathematischen Optimierungstechniken* beweisbar optimal (oder annähernd optimal) gelöst werden. Wir verwenden einen Ansatz der ganzzahligen Programmierung, der auf einem Multi-Commodity-Flow-Modell basiert. Im Gegensatz zu vielen anderen Methoden wird das Problem dabei nicht zerstückelt oder der Lösungsraum eingeschränkt, sondern es werden alle Freiheitsgrade zur Optimierung genutzt. Unsere Modelle führen auf ganzzahlige lineare Programme mit bis zu 70 Millionen Variablen, die wir mit neuartigen Lagrange- und LP-Techniken und mit speziell entwickelten Netzwerkflußalgorithmen bearbeiten.

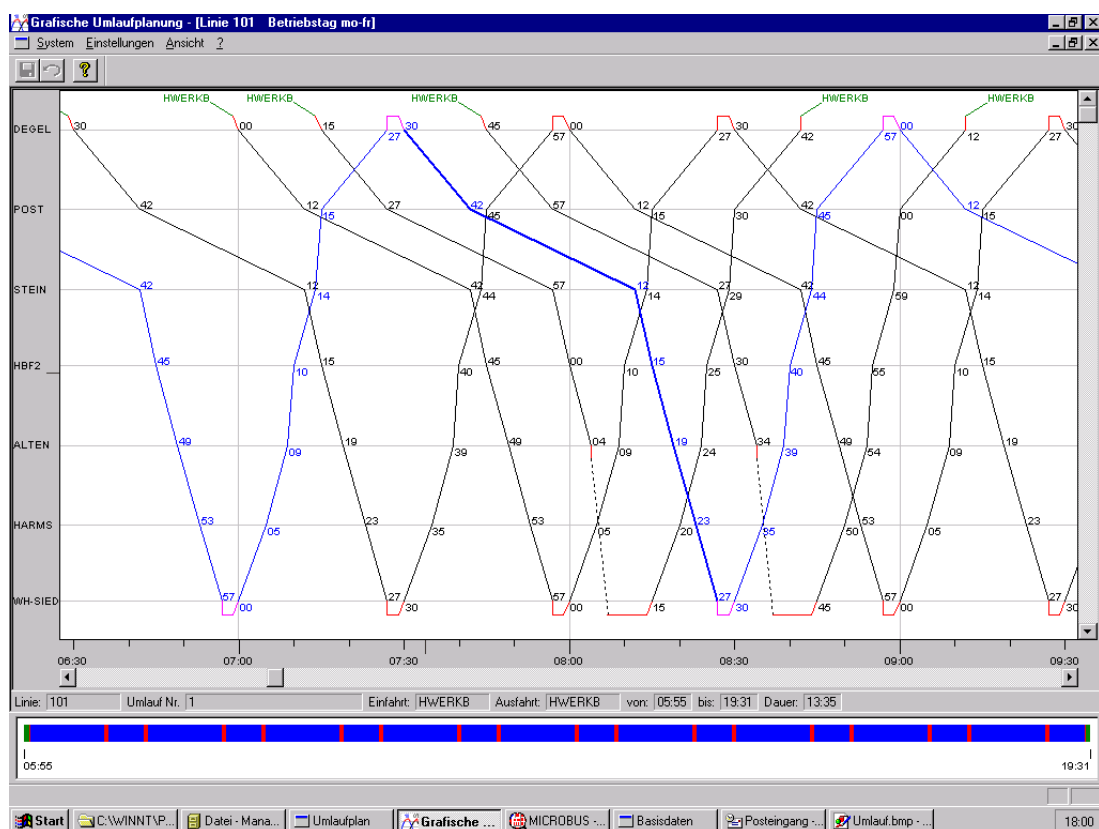


ABBILDUNG 2.27: Ausschnitt eines Umlaufplans.

Der *Transfer* unserer Algorithmen in die Softwareprodukte unserer marktführenden Kooperationspartner HanseCom GmbH und IVU GmbH wird vorbereitet bzw. ist bereits erfolgt, und auch die Siemens AG hat Vertriebsrechte an unserem Verfahren erworben. Testrechnungen für die BVG, die HHA und die VHH belegen ein großes Einsparungspotential für diese Verkehrsbetriebe: Allein für den Betriebshof Spandau in Berlin ist eine Fahrzeugeinsparung von 38 Fahrzeugen (19.5%) möglich (diese Zahlen sind

von der BVG evaluiert), bei der HHA wurde eine Reduktion um 26 Fahrzeuge (3.1%) und etwa 10% der Betriebskosten erzielt, bei der VHH konnte die Güte der derzeitigen Planung nachgewiesen werden: Hier wurde bereits die minimale Anzahl an Fahrzeugen verwendet, aber die Betriebskosten lassen sich nochmals um 5.7% senken.

Optimierungsmethoden zur Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV werden in dem Übersichtsartikel [9] behandelt, ihre Anwendung bei der BVG in [17]. Die mathematischen Verfahren finden sich in der Dissertation [14], einzelne Aspekte werden diskutiert in [13, 16] (LP-Techniken), [12] (Lagrange-Verfahren), [15] (Dantzig-Wolfe Dekomposition).

Dienstplanung im ÖPNV

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Andreas Löbel

Kooperationspartner: HanseCom GmbH (Hamburg); Gesellschaft für Informatik, Verkehrs- und Umweltplanung GmbH — IVU (Berlin)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie

Wie in der operativen Planung der Verkehrsbetriebe, so ist auch unser neues Projekt zur Optimierung der *Dienstplanung* im ÖPNV ein Nachfolger der Fahrzeugumlaufplanung. Hier gilt es, sich aus den Fahrzeugumläufen ergebende Dienstelemente derart zu Tagesdiensten zu verketteten, daß der Personalbedarf insgesamt möglichst gering ist. Dabei müssen selbstverständlich alle Arten von tarifrechtlichen, sozialen, betriebstechnischen und betrieblichen Regelungen beachtet werden. Bei den Problemen unserer Kooperationspartner rechnen wir dabei für *einen einzigen Betriebshof* mit etwa 10.000 Dienstelementen.

Wir erwarten nicht, daß wir diese komplexen und großen Probleme optimal lösen können, aber wir glauben, daß wir in vertretbarer Rechenzeit deutlich bessere Ergebnisse erzielen werden, als dies mit den derzeit verwendeten Verfahren möglich ist. Unser methodischer *Ansatz* unterscheidet sich von dem bei der Umlaufplanung, obwohl die beiden Probleme bei oberflächlicher Betrachtung ähnlich aussehen. Aber wir müssen bei der Dienstplanung Bedingungen wie Pausenregelungen, Arbeitszeiten, etc. algorithmisch berücksichtigen. Dazu entwickeln wir einerseits auf Set-Partitioning- und Set-Covering-Modellen der ganzzahligen Programmierung basierende Branch-and-Price-Verfahren, während wir andererseits aus kombinatorischen Relaxierungen untere Schranken zur Bewertung der Lösungsqualität ableiten.

Unser Projekt wird je zur Hälfte vom BMBF und von den Industriepartnern finanziert, der *Transfer* unserer Algorithmen in deren Softwareprodukte ist Bestandteil unserer Kooperationsverträge.

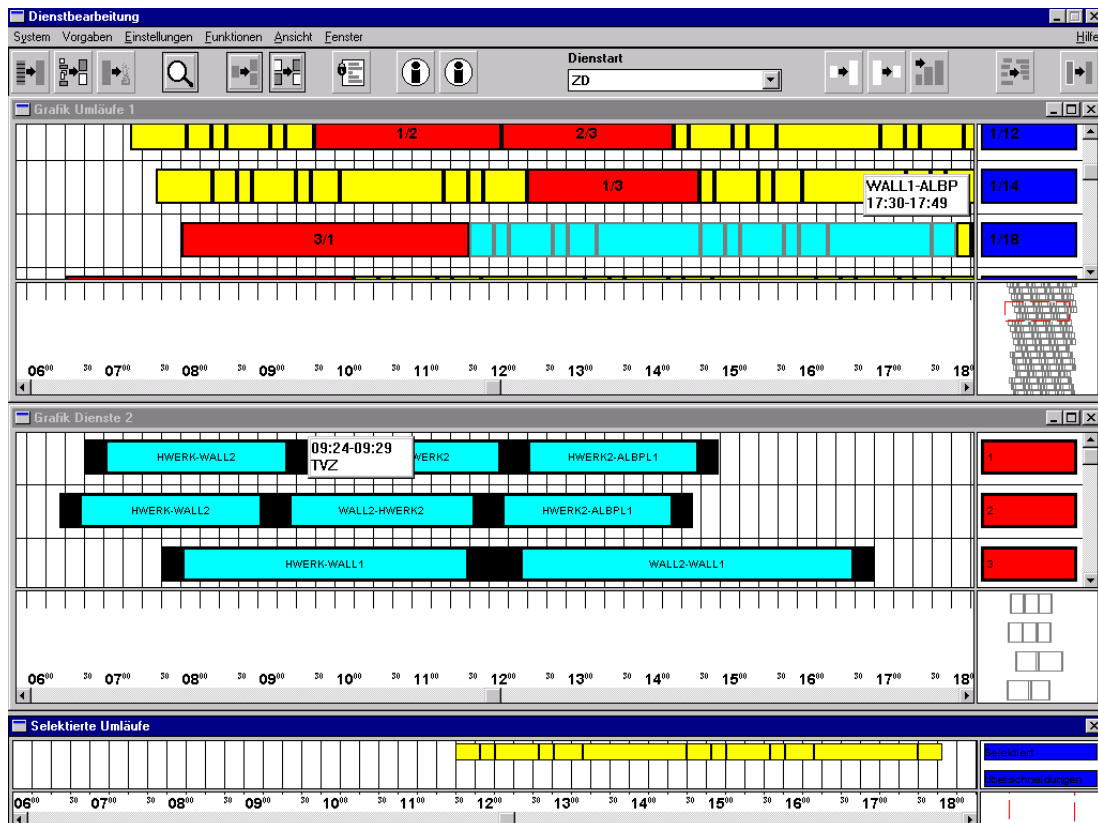


ABBILDUNG 2.28: Ausschnitt eines Dienstplans.

Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel

Kooperationspartner: Berliner Senatsverwaltung für Gesundheit und Soziales; Berliner Zentralausschuß für Soziale Aufgaben e.V. (BZA); Intranetz Gesellschaft für Informationslogistik mbH

Förderung: Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

Die *Fahrzeugeinsatzplanung im Behindertentransport* ist eine Fragestellung, die im Grenzbereich zwischen Off-Line- und On-Line-Optimierung angesiedelt ist: Die Kunden einer (von der öffentlichen Hand finanzierten) Anrufsammeltaxizentrale müssen mit einer täglich neu angemieteten Fahrzeugflotte abgeholt und zu ihren gewünschten Fahrtzielen befördert werden. Die besonderen Bedürfnisse von behinderten Kunden führen dabei im Vergleich zu anderen AST-Systemen zu einer Reihe von zusätzlichen Komplikationen wie der Erfordernis von gewissen Serviceleistungen, etc., gleichzeitig sollen aber die Anmietungskosten der Fahrzeuge niedrig gehalten werden. Beim Berliner Behindertenfahrdienst Telebus, der von unserem Kooperationspartner BZA betrieben wird, geht es um eine Flotte von mehr als 100 Bussen, die zur Bedienung von bis zu 2.000 Fahrtwünschen eingesetzt werden. Es versteht sich von selbst, daß die Kunden gerne wie bei jedem Taxi On-Line buchen würden, doch ist dies derzeit beim Telebus

aus organisatorischen Gründen nicht (oder nur sehr begrenzt) möglich.

Deshalb bearbeiten wir eine Off-Line-Version des Problems der Fahrzeugeinsatzplanung, die von einer fixen Mengen von Fahrtwünschen ausgeht und den betrieblichen Gegebenheiten beim BZA entspricht. Zur *mathematischen Behandlung* der komplizierten Regeln des Behindertentransports verwenden wir ein Set-Partitioning-Modell. Ausgehend von diesem Ansatz entwickeln wir Branch-and-Cut-Techniken, die auf Methoden der polyedrischen Kombinatorik fußen. Die Telebus-Set-Partitioning-Probleme stellten sich allerdings als unerwartet „hart“ heraus, und wir können die zugehörigen ganzzahligen Programme im Moment nicht optimal lösen. Aber die Fahrzeugeinsatzpläne, die unsere Algorithmen berechnen, haben bereits mit dazu beigetragen, daß Telebus heute mit genau demselben Betrag an Geld wie zu Beginn des Projektes 1992 etwa 1/3 mehr Beförderungen durchführt.

Zwei *Transfers* unserer Verfahren sind bereits erfolgt: Eine (zweite) Ausbaustufe unseres Telebus-Optimierungssystems ist seit dem 03. Juni 1995 beim BZA im Einsatz, und zwei der Projektmitarbeiter haben das Softwareunternehmen Intranetz GmbH gegründet, mit dem unser Institut weiterhin im Telebus-Projekt kooperiert.

Aspekte der Fahrzeugeinsatzplanung am Beispiel des Telebus-Fahrdienstes werden diskutiert in den Artikeln [4, 5], Verfahren der Tourenenerzeugung beschreiben [11], eine Beschreibung der mathematischen Grundlagen findet sich in [3, 5, 7, 8].

Echtzeitsteuerung automatischer Transportsysteme

Bearbeitet von: Norbert Ascheuer, Martin Grötschel, Nicola Kamin, Jörg Rambau

Kooperationspartner: Herlitz AG (Berlin)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“

Im zentralen Versandzentrum unseres Kooperationspartners Herlitz AG, Berlin, erfolgt der interne Materialfluß vom Wareneingang zu den automatischen Hochregallagern und verschiedenen Kommissionierbereichen sowie zum Warenausgang, mittels moderner, automatisierter Fördertechnik. Permanent gehen Warenanlieferungen und Bestellungen ein, die unverzüglich zu bearbeiten sind. Ziel des Projekts ist die Gesamtoptimierung des Materialflusses von der Warenanlieferung bis zur Auslieferung der Bestellungen. Gegenwärtig bearbeiten wir zwei Problemfelder.

Der erste Bereich ist die Glückwunschkartenkommissionierung. Dort fahren auf einem festen Rundkurs acht Kommissioniermobile, die bis zu 19 Aufträge gleichzeitig bearbeiten können, an Regallagern entlang. Auf dem Kurs kann es zu Staus kommen, da die Mobile einander nicht überholen können. Das Problem der Steuerung der Kommissioniermobile besteht darin, die Aufträge so auf die Fahrzeuge zu verteilen, daß eine schnellstmögliche und termingerechte Bearbeitung gewährleistet ist.

Unser Ansatz zur Lösung des Fahrzeugsteuerungsproblems ist, die Anzahl der Stopps der Mobile zu verringern und das Auftreten von Staus zu vermindern. Dazu entwickeln

wir Echtzeit-Heuristiken, deren Qualität wir einerseits durch Simulation [1], andererseits durch eine A-Posteriori-Analyse mit Hilfe entsprechender ganzzahliger linearer Programme untersuchen. Bei bis zu 700 Aufträgen täglich entstehen so Probleme mit mehreren zehntausend Zeilen und Spalten, die wir mit LP-Techniken bearbeiten. Besonders wichtig ist dabei die Ausnutzung von Präzedenzstrukturen. Die Simulationsergebnisse zeigen, daß durch unsere Echtzeitverfahren die Bearbeitungszeit der Aufträge deutlich verkürzt werden kann, selbst wenn nur sechs oder sieben Mobile eingesetzt werden. Für die Probleme bei Herlitz liefern diese Heuristiken sogar im A-Posteriori-Vergleich Lösungen guter Qualität [10].

Ein zweiter Bereich ist die effiziente Steuerung des gesamten Palettentransport- und -lagersystems, welches aus Stetigförderern, Aufzugsystemen und Regalbediengeräten besteht. Optimierungsziel ist die termingerechte Verfügbarkeit der Paletten. Für die Bereiche Aufzugsteuerung und Hochregallager wurden detaillierte Simulationsmodelle entwickelt und implementiert, sowie erste Optimierungsansätze erarbeitet.

In der Steuerung von Regalbediengeräten haben wir Erfahrungen aus einem ähnlichen Projekt in Kooperation mit der Siemens-Nixdorf-Informationssysteme AG, Augsburg. In diesem Projekt wurde ein Optimierungspaket zur Minimierung der Leerfahrzeit entwickelt, dem Untersuchungen einer On-Line Variante des Asymmetrischen-Travelling-Salesman-Problems zugrundelagen [2]. Auch für die Hochregallager der Herlitz AG werden TSP-Varianten (Präzedenzrelationen) verwendet werden.

Publikationen

- [1] *Amsel—a modelling and simulation environment library*, 1997, Entwickelt am Konrad-Zuse-Zentrum Berlin. Online-Dokumentation unter <http://www.zib.de/ascheuer/AMSEL>.
- [2] N. Ascheuer, *Hamiltonian path problems in the on-line optimization of flexible manufacturing systems*, Dissertation, Tech. Univ. Berlin, 1995.
- [3] R. Borndörfer, *Aspects of set packing, partitioning, and covering*, Dissertation (eingereicht), Tech. Univ. Berlin, 1997.
- [4] R. Borndörfer, M. Grötschel, W. Herzog, F. Klostermeier, W. Konsek und Ch. Küttner, *Kürzen muß nicht Kahlschlag heißen — das Beispiel Telebus-Behindertenfahrdienst Berlin*, Preprint SC 96–41, ZIB, 1996, erscheint in *VOP*.
- [5] R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier und Ch. Küttner, *Optimierung des Berliner Behindertenfahrdienstes*, DMV Mitteilungen 2 (1997), 38–43.
- [6] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Alcuin's Transportation Problems and Integer Programming*, Preprint SC 95–27, ZIB, 1995.
- [7] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*, Preprint SC 97–30, ZIB, 1997.

- [8] ———, *Relations Among Some Combinatorial Programs*, Preprint SC 97–54, ZIB, 1997.
- [9] M. Grötschel, A. Löbel und M. Völker, *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im öffentlichen Nahverkehr*, in K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann und H. Schunck (Hrsg.), *MATHEMATIK – Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, Springer, 1997, 609–624.
- [10] N. Kamin, *On-line optimization of order picking in an automated warehouse*, Dissertation (eingereicht), Tech. Univ. Berlin, 1997.
- [11] F. Klostermeier und Ch. Küttner, *Kostengünstige Disposition von Telebussen*, Diplomarbeit, Tech. Univ. Berlin, 1993.
- [12] A. Kokott und A. Löbel, *Lagrangean Relaxations and Subgradient Methods for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Preprint SC 96–22, ZIB, 1996.
- [13] A. Löbel, *Solving Large-Scale Real-World Minimum-Cost Flow Problems by a Network Simplex Method*, Preprint SC 96–07, ZIB, 1996.
- [14] ———, *Optimal vehicle scheduling in public transit*, Dissertation, Tech. Univ. Berlin, 1997.
- [15] ———, *Experiments with a Dantzig-Wolfe-Decomposition for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Preprint SC 97–16, ZIB, 1997.
- [16] ———, *Recent computational developments for large-scale multiple-depot vehicle scheduling problems*, Preprint SC 97-17, ZIB, 1997.
- [17] A. Löbel und U. Strubbe, *Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und praktische Anwendung*, Heureka '96: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln, 1996. 341–355.

2.2.14 Telekommunikation

Die Telekommunikationstechnologie spielt eine Schlüsselrolle in der Informationsgesellschaft, da sie u.a. die Möglichkeit bietet, große Datenmengen schnell zu übertragen. Den verschiedenen Techniken zur Datenübermittlung ist gemeinsam, daß die Ressourcen beschränkt und teuer sind. Die Frage nach einer möglichst effektiven Nutzung der Ressourcen läßt sich nach geeigneter Modellierung mit Methoden der ganzzahligen Optimierung behandeln.

In Kooperation mit verschiedenen Industriepartnern (Bosch, DFN, E-Plus, Siemens) arbeiten wir zur Zeit an sechs Projekten im Bereich Telekommunikation. Drei der Aufgabenstellungen kommen aus der Netzwerkdimensionierung, zwei aus der Frequenzplanung und eine aus der Dimensionierung von Call-Centern.

Approximation von Forderungsströmen in Systemen mit selektiver Trunk-Reservation

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: Siemens AG (München)

Forderungsströme in Vermittlungssystemen werden häufig durch die ersten beiden Momente beschrieben, d.h. durch den Mean M und die Peakedness Z . Eine Möglichkeit der Modellierung besteht darin, die am Link eintreffenden Ströme durch vom Zustand des Links abhängige Ankunftsintensitäten zu modellieren. Aus heuristischen Gründen, vgl. [2], bietet sich ein bzgl. der Anzahl der belegten Trunks linearer Ansatz für die Intensitäten an. Untersucht werden soll das folgende System:

An einem Link fester Kapazität treffen zwei Forderungsströme ein, die einen Direktverkehr und einen Überlaufverkehr repräsentieren. Die ankommenden Forderungen benötigen jeweils genau einen Trunk. Der Direktverkehr ist geschützt, d.h., er wird angenommen, sofern noch ein Trunk frei ist. Der Überlaufverkehr wird nur angenommen, falls mindestens noch eine vorgegebene Anzahl von Trunks frei ist (Trunk-Reservation), vgl. [1]. Die Belegungszeiten aller ankommenden Forderungen sind exponentialverteilt mit gleichem Mittelwert.

Für das betrachtete System ist eine Charakterisierung der folgenden drei Abgangsströme durch ihren Mean und ihre Peakedness von Interesse:

Mean und Peakedness des gehenden Direktverkehrs (carried traffic),

Mean und Peakedness des gehenden Überlaufverkehrs (carried traffic),

Mean und Peakedness des gesamten blockierten Verkehrs (overflow traffic).

Dimensionierung eines Inbound-Call-Center mit Voice-Mail-Server

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: Siemens AG (München)

Aufbauend auf frühere Untersuchungen von Call-Centern mit ungeduldfigen Kunden, vgl. [4], wird ein Inbound-Call-Center bestehend aus einer Gruppe von Agenten, einem Warteraum endlicher Kapazität und einem Voice-Mail-Server (VMS) unendlicher Kapazität analysiert.

Am System treffen von außerhalb Inbound Calls gemäß einem Poissonstrom ein. Ist bei einer Ankunft ein Agent frei, so wird der ankommende Inbound Call sogleich bedient. Sind bei einer Ankunft alle Agenten beschäftigt und ist noch ein Warteplatz frei, so geht der ankommende Inbound Call mit einer von der Anzahl der schon belegten Warteplätze abhängenden Wahrscheinlichkeit sofort in den VMS, sonst belegt er den ersten freien Warteplatz. Sind alle Warteplätze besetzt, so geht ein ankommender Inbound Call verloren (blocking).

Die Warteschlangendisziplin ist "first come first served" (FCFS). Überschreitet die vir-

tuelle Wartezeit eines Inbound Calls, d.h. die Wartezeit, die ein Call bis zum Beginn seiner Bedienung zu warten hätte, eine zufällige Zeit U (maximale Geduld) oder die deterministische Zeit T (technische Ungeduld), so wird der Inbound Call, nachdem er die Zeit $\min(U, T)$ gewartet hat, im Fall U kleiner als T wegen individueller Ungeduld verloren gehen und sonst in den VMS umgelenkt und dort geparkt werden. Die im VMS geparkten Calls werden später durch einen Agenten zurückgerufen, d.h., sie entsprechen dann Outbound Calls. Sobald mehr als eine vorgegebene Anzahl von Agenten frei ist wird ein im VMS geparkter Call – falls einer vorhanden ist – zurückgerufen. Die Bedienzeiten der Inbound und Outbound Calls durch die Agenten sind exponentialverteilt mit gleichem Mittelwert.

Für das betrachtete Inbound-Call-Center mit Überlauf in einen VMS sind die Verlustwahrscheinlichkeit (blocking probability), die Wahrscheinlichkeit des Verlustes akzeptierter Inbound Calls durch individuelle Ungeduld, die Verteilung der Wartezeit im Warteraum, die Intensität der im VMS eintreffenden Calls und die mittlere Aufenthaltsdauer der im VMS geparkten Calls von besonderem Interesse.

Ein wesentlicher Teil des beschriebenen System läßt sich mathematisch durch ein $M(n)/M(m)/s+GI$ Warteschlangen-System modellieren, wobei s der Anzahl der Agenten entspricht. Für dieses Warteschlangen-System wurde ein System von Integralgleichungen für den Vektor der Restgeduldszeiten und maximalen Geduldszeiten aufgestellt und explizit gelöst, wodurch bekannte Ergebnisse in [5] für das genannte Warteschlangen-System erheblich verallgemeinert werden konnten, vgl. [3]. Die Lösung liefert für das Warteschlangen-System die stationäre Anzahlverteilung sowie verschiedene Wartezeitverteilungen. Für das Inbound-Call-Center mit VMS lassen sich hieraus bis auf die mittlere Verweilzeit im VMS die oben genannten Performance-Größen exakt berechnen. Für die mittlere Verweilzeit im VMS wurde eine Approximation hergeleitet.

Optimierung von Kapazitäten und Verkehrsflüssen im B-WiN

Bearbeitet von: Andreas Bley, Martin Grötschel, Roland Wessälly

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

Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Methoden und Werkzeugen zur kombinierten Topologie-, Kapazitäts- und Routenplanung für das Breitband Wissenschaftsnetz (B-WiN) in Deutschland. Das B-WiN dient dem „Informations- und Datenaustausch zwischen Einrichtungen und Personen aus Wissenschaft, Forschung, Bildung und Kultur“ im In- und Ausland. Es wird derzeit als Broadband Virtual Private Network (BVPN) auf dem ATM-Cross-Connect-Netz der Deutschen Telekom AG betrieben. In das installierte (gemietete) Gesamtnetz sind Subnetze für die verschiedenen Verkehrstypen (zur Zeit IP und ATM) eingebettet.

Momentan umfaßt das Netz zehn zentrale Service-Switches. Prinzipiell kann zwischen je zwei Switches eine Verbindung installiert werden. Deren Kapazität muß aus einer ge-

gebenen Menge von zulässigen Kapazitäten gewählt sein. Die Anzahl von zu installierenden Verbindungen ist festgelegt. Für jedes Paar von Switches und jeden Verkehrstyp ist ein Bedarfswert gegeben. Ferner gibt es für jeden Verkehrstyp spezielle Restriktionen: Für den IP-Verkehr ist zum Beispiel das OSPF Routingprotokoll (Open Shortest Path First) zu verwenden. Dabei ist jeder Bedarf auf einem kürzesten Weg bezüglich einer Kantengewichtsfunktion im IP-Netz zu routen. Außerdem können aufgrund der verwendeten Hardware nur bestimmte Kapazitäten für die Verbindungen im IP-Subnetz verwendet werden.

Ziel der Planung ist ein kostengünstiges "robustes" Gesamtnetz und entsprechende Subnetze für die verschiedenen Verkehrstypen. Robust bedeutet hierbei zum einen Ausfallsicherheit, d.h., daß auch beim Ausfall von einzelnen Verbindungen oder Switches der gesamte nicht vom Ausfall betroffene Teil des Bedarfs oder aber nur ein bestimmter Teil dieses Bedarfs, je nach Verkehrstyp, weiterhin geroutet werden kann. Zum anderen bedeutet es Stabilität der Lösung; die Topologie des Gesamtnetzes und die der eingebetteten Netze sollen bei geringer Änderung der Bedarfswerte unverändert bleiben, da mit Topologieänderungen auch kostenintensive Hardware- und unter Umständen Vertragsänderungen verbunden sind. Änderungen der Kapazitäten und der Routingwege sind dagegen auch kurzfristig bei Bedarfsänderungen möglich.

Zu Beginn des Projektes wurden überwiegend primale heuristische Verfahren zur Lösung des Problems auf der IP-Ebene entworfen und als Prototypen implementiert. Nach Tests mit mehreren realen Datensätzen im Sommer 1997 wurde ein flexibles Software-System zur Lösung von Netzwerkdimensionierungsproblemen implementiert, in das diese Heuristiken integriert wurden.

Frequenzplanung für PMP-Systeme

Bearbeitet von: Andreas Bley, Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel, Annegret Wagler, Roland Wessälly

Kooperationspartner: BOSCH-Telecom GmbH (Backnang)

In Kooperation mit BOSCH-Telecom wird an der Frequenzzuweisung in Point-to-Multipoint-Systemen (PMP-Systemen) gearbeitet. PMP-Systeme werden eingesetzt, wenn die Datenübertragung von einem Festnetz zu den einzelnen Kunden durch Richtfunkstrecken realisiert wird. Endpunkte des Festnetzes sind Antennen, die alle Kunden in einem festgelegten Teilgebiet (Sektor) bedienen (daher der Name PMP-System). Der Unterschied zum Mobilfunk ist, daß sowohl die Standorte der Kunden als auch deren Zuordnung zu den einzelnen Sektoren fest sind.

Die Funkverbindungen zu den Kunden eines Sektors stören sich, falls die gleiche Frequenz benutzt wird. Zusätzlich bestehen Interferenzbeziehungen zwischen Kunden aus verschiedenen Sektoren. Den einzelnen Richtfunkverbindungen sollen Frequenzen aus einem vorgegebenen Frequenzspektrum zugewiesen werden. Dabei sind alle Interferenzbeziehungen, einige technische Nebenbedingungen und der Kommunikationsbedarf der einzelnen Kunden zu berücksichtigen.

Ein weiteres Problem ist die Zuweisung jeweils eines Broadcast-Kanals zu jedem Sektor. Diese Kanäle dienen der technischen Kommunikation zwischen Sektorantenne und den Kunden des Sektors (z.B. zur Anforderung einer Datenübertragung). Dabei sind die Interferenzbeziehungen zwischen allen Kunden der einzelnen Sektoren zu berücksichtigen.

Das Frequenzzuweisungsproblem kann als neuartiges Schedulingproblem modelliert werden. Für diese Art von Schedulingproblemen sind noch keine theoretischen Ergebnisse oder anwendbaren Algorithmen bekannt. Im ersten Halbjahr der Projektlaufzeit wurden Datenstrukturen, Zulässigkeitstests und primale Heuristiken entworfen und implementiert. Die Entwicklung von Verbesserungs-Heuristiken ist geplant.

Das Broadcast-Kanal-Problem kann als Graphenfärbungsproblem modelliert werden. Zur Zeit werden dafür verschiedene Heuristiken und ein exaktes Verfahren implementiert.

Frequenzzuweisung im Mobilfunk

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel, Alexander Martin

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Jedem Mobilfunknetzbetreiber steht ein kleiner Teil des elektromagnetischen Frequenzspektrums zur Verfügung, um Funkverkehr mit Mobiltelefonen abzuwickeln. Bei Mobilfunknetzen, die nach dem GSM-Standard betrieben werden, wird u. a. ein Frequenzmultiplexverfahren eingesetzt, so daß das verfügbare Spektrum in Kanäle eingeteilt ist. Für die Kommunikation mit den Mobiltelefonen werden stationäre Sende-/Empfangseinheiten, sogenannte Transceiver, genutzt. Jedem Transceiver ist ein Kanal zugeordnet, und die Mobiltelefone stellen sich jeweils auf den Kanal des Transceivers ein, über den sie gerade mit dem Funknetz logisch verbunden sind.

Ein zentrales Problem ist, daß nahegelegene Transceiver sich stören, sofern sie Kanäle verwenden, die dicht beieinander liegen. Im Regelfall heißt das: wenn sie denselben oder benachbarte Kanäle verwenden. Nun übersteigt die Anzahl der Transceiver die der verfügbaren Kanäle um den Faktor 50 oder mehr. Zwingend müssen also Kanäle mehrfach verwendet werden. Welche Transceiver sich gegebenenfalls stören, wird durch aufwendige Interferenzprädiktionen oder Meßfahrten ermittelt.

Bei der Erstellung eines „Frequenzplanes“ hat der Netzbetreiber für jeden Transceiver festzulegen, welcher Kanal genutzt wird. Dies geschieht unter Berücksichtigung einer Reihe von technischen und rechtlichen Nebenbedingungen mit dem Ziel, möglichst wenig störende Interferenzen zu verursachen.

Dieses Projekt läuft seit September 1995 und hat die Entwicklung von Verfahren zur automatischen Erstellung von Frequenzplänen zum Ziel. Zunächst standen der Entwurf und die Implementierung von schnellen *primale Heuristiken* zur Berechnung interferenzarmer Zuweisungen im Mittelpunkt. Im Vergleich zu den bisher genutzten Verfah-

ren konnten deutliche Verbesserungen erzielt werden [6], siehe Abbildung 2.29. Nun wird an der Entwicklung eines *Branch&Cut-Verfahrens* für dieses Problem gearbeitet. Kleine Probleme können bereits optimal gelöst werden.

Im Rahmen des *Forschungsmarkt Berlin* wurden auf der CeBIT 1977 unter dem Titel „Optimierung im Mobilfunk“ (zusammen mit dem Projekt zur Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus) mehrere der entwickelten Algorithmen demonstriert. Hierzu wurde eigens eine JAVA-basierte grafische Benutzeroberfläche erstellt.

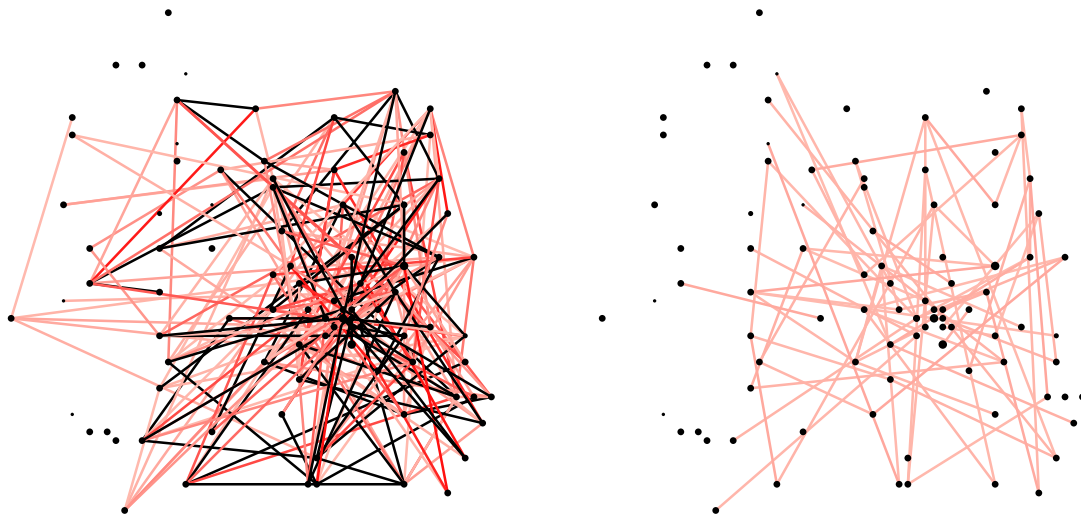


ABBILDUNG 2.29: Die beiden Bilder zeigen die Interferenzsituation eines Gebietes für zwei verschiedenen Frequenzpläne. Die schwarzen Punkte stellen Standorte von Transceivern dar. Interferieren zwei Transceiver, so ist dies durch eine Linie symbolisiert. Je dunkler die Linie, desto stärker ist die Interferenz. Links ist die Interferenzsituation für einen Plan visualisiert, der mit einem kommerziellen Planungswerkzeug erstellt wurde. Der Plan, der dem rechten Bild zugrundeliegt, wurde mit im Rahmen des Projektes entwickelten primalen Heuristiken berechnet. Die Interferenz ist auf 4.2% des Ausgangswertes reduziert.

Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Roland Wessäly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

In Kooperation mit E-Plus wird an der kostengünstigen Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus gearbeitet. Neben zahlreichen Funkstationen für den Kontakt zu den Mobiltelefonen benötigt ein Mobilfunknetz ein Festnetz zur Verbindung der Funkstationen untereinander sowie zur Anbindung anderer Telefonnetze im In- und Ausland. Das Festnetz besteht in der Regel aus einer Menge von Vermittlungszentralen (–rechnern), die mit angemieteten Leitungen, derzeit von der Deutschen Telekom, und

Richtfunkstrecken verbunden werden. In diesem Projekt werden verschiedene Modelle zur kostengünstigen Dimensionierung eines „ausfallsicheren“ Festnetzes zwischen den Vermittlungszentralen entwickelt.

Gemeinsam ist den Modellen, daß zwischen je zwei Vermittlungszentralen ein Bedarf und eine Menge potentiell installierbarer Kapazitäten gegeben ist und die Kapazitäten so gewählt werden müssen, daß der gegebene Bedarf „ausfallsicher“ geroutet werden kann. Die Modelle unterscheiden sich in den potentiell installierbaren Kapazitäten und der Spezifikation von Ausfallsicherheit.

Unter Ausfallsicherheit wird verstanden, daß bei Ausfall einer Vermittlungszentrale, oder einer Verbindung zwischen diesen, ein spezifizierbarer Teil des Bedarfs weiterhin geroutet werden kann. Dies läßt sich auf eine der folgenden Arten erreichen: durch diversifizierte Pfade, durch vollständiges Umrouten bei Ausfall oder durch Umrouten des ausfallenden Verkehrs. Einen Überblick über die verschiedenen Modelle findet man in [9].

Zur Dimensionierung des Festnetzes zwischen den Vermittlungszentralen von E-Plus wurden primale Heuristiken und ein Schnittebenenverfahren (siehe [7, 8]) erarbeitet. Unter anderem werden im Schnittebenenverfahren untere Schranken für den Wert einer optimalen Lösung berechnet. Zusammen mit den Lösungen der primalen Heuristiken kann somit die Güte der ermittelten Lösungen abgeschätzt werden.

Die entwickelten Verfahren wurden in C++ implementiert. Zusätzlich wurde eine graphische Benutzeroberfläche zur komfortablen Nutzung der verschiedenen Modelle in JAVA implementiert und mit in das Netzwerkdimensionierungstool DISCNET (Dimensioning Survivable Cellular phone NETWORKS) integriert. DISCNET ist bei E-Plus installiert und wird bereits zur jährlichen Dimensionierung des Festnetzes eingesetzt.

Publikationen

- [1] A. Brandt, M. Brandt und H. Pohl, *Approximation der Überlaufströme bei Systemen mit selektiver Trunk-Reservation für heterogene Quellen*, erhältlich unter <http://www.wiwi.hu-berlin.de/or/preprints/preprints.shtml>
- [2] L. E. N. Delbrouck, *A unified approximate evaluation of congestion functions for smooth and peaky traffics*, IEEE Trans. on Comm. **29** (1981), 85–91.
- [3] A. Brandt und M. Brandt, *On the $M(n)/M(m)/s$ Queue with Impatient Calls*, Preprint SC 97–19, ZIB, 1997.
- [4] A. Brandt, M. Brandt, G. Spahl und D. Weber, *Modelling and Optimization of Call Distribution Systems*, Teletraffic Contributions for the Information Age, Proceedings of the 15th International Teletraffic Congress – ITC 15 (Washington), Elsevier, 1997, 133–144.

- [5] O. M. Jurkevič, *On many-server systems with stochastic bounds for the waiting time (in Russian)*, Izv. Akad. Nauk SSSR Techničeskaja kibernetika **4** (1971), 39–46.
- [6] R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin, *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*, Preprint SC 97–35, ZIB, 1997.
- [7] D. Alevras, M. Grötschel, and R. Wessäly, *A Network Dimensioning Tool*, Preprint SC 96–49, ZIB, 1996.
- [8] D. Alevras, M. Grötschel, and R. Wessäly, *Cost-Efficient Network Synthesis from Leased Lines*, Preprint SC 97–22, ZIB, 1997.
- [9] D. Alevras, M. Grötschel, and R. Wessäly, *Capacity and Survivability Models for Telecommunication Networks*, Preprint SC 97–24, ZIB, 1997.

2.2.15 Stochastische Optimierung und Anwendungen

Zufallsbehaftete Optimierungsprobleme sind von wachsender Bedeutung in vielen Bereichen der Praxis. In diesem Projekt entwickeln wir Methoden zur Lösung solcher Aufgaben. Mathematisch führt dies auf hochdimensionale gemischt-ganzzahlige bzw. nichtlineare Optimierungsprobleme, die mit Hilfe von Dekompositions- und Rekursionsansätzen gelöst werden. Die Entwicklung von Algorithmen und Software erfolgt in Kooperation mit Praxispartnern aus der Elektrizitäts- und Finanzwirtschaft. In einem weiteren Teilprojekt befassen wir uns mit der Entwicklung von Algorithmen zur Berechnung der Zuverlässigkeit von technischen Systemen, wie z.B. Flugzeugturbinen.

Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung

Bearbeitet von: Ralf Gollmer, Alexander Martin, Rüdiger Schultz, Robert Weismantel
Kooperationspartner: Werner Römisch (Humboldt-Universität zu Berlin); Vereinigte Energiewerke AG Berlin (VEAG)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie

Unter optimaler Blockauswahl (unit commitment) versteht man die kostenoptimale Auswahl von Erzeugereinheiten eines Kraftwerkssystems, so daß die auftretende Last in einem gewissen Planungszeitraum gedeckt wird und weitere wirtschaftliche und technologische Randbedingungen eingehalten werden. Unser Zugang zur optimalen Blockauswahl ermöglicht, in Abstimmung auf die speziellen Gegebenheiten beim Kooperationspartner VEAG, die simultane Optimierung von thermischer und wassergebundener Erzeugung sowie die Einbeziehung von Mengen-Preis-Staffelungen für einzelne Brennstoffe [5]. Für die resultierenden hochdimensionalen gemischt-ganzzahligen linearen Optimierungsprobleme wurden primale und duale Verfahren entwickelt, implementiert und an realen Daten der VEAG getestet [3, 6]. Dabei konnten

Aufgaben mit mehreren tausend booleschen und mehreren zehntausend stetigen Variablen bei Gütegarantien im Promille- und Rechenzeiten im Minutenbereich auf Workstations gelöst werden.

Optimale Lastverteilung mit unvollständiger Information unter Echtzeit-Bedingungen

Bearbeitet von: Rüdiger Schultz

Kooperationspartner: Claus C. Carøe (University of Copenhagen, Dänemark); Werner Römisch (Humboldt-Universität zu Berlin); Andrzej Ruszczyński (Rutgers University, USA); Vereinigte Energiewerke AG Berlin (VEAG)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“

Ausgehend von der Erzeugerstruktur beim Kooperationspartner VEAG wurden zwei- und mehrstufige stochastische Optimierungsmodelle entwickelt, die auf eine zeitkritische Optimierung des Kraftwerkseinsatzes bei unvollständigem Datensatz zielen [1, 4, 7]. Der gegenwärtige Stand der Modellierung berücksichtigt Ungewißheit hinsichtlich des Lastverlaufs. An der Erweiterung der Modelle in Richtung ungewisser Modellparameter, die im Zuge der Deregulierung des Strommarktes zu berücksichtigen sind, wird gearbeitet.

Strukturell betrachtet sind unsere Echtzeit-Optimierungsmodelle hochdimensionale, mehrfach verkoppelte gemischt-ganzzahlige lineare Programme. Bei der Algorithmenentwicklung werden zwei prinzipielle Zugänge verfolgt:

- Relaxierung von Last- und Reservebedingungen und damit Zerlegung in mehrstufige stochastische Programme, die den individuellen Erzeugereinheiten entsprechen [7],
- Relaxierung der Informations-Nebenbedingungen und damit Zerlegung in deterministische Blockauswahlprobleme, die den einzelnen Szenarien des Lastverlaufs entsprechen [1].

Unter Einbeziehung von Datenmaterial der VEAG wurden für beide Verfahrensansätze erste Testrechnungen ausgeführt [1, 7].

Rekursive Algorithmen zur mehrstufigen stochastischen konvexen Optimierung

Bearbeitet von: Marc C. Steinbach

Kooperationspartner: Karl Frauendorfer, Heiko Siede (Universität St. Gallen, Schweiz)

In diesem Projekt wird ein neuer Ansatz zur Lösung sehr großer mehrstufiger stochastischer Optimierungsprobleme verfolgt, der besonders im (konvexen) nichtlinearen Fall erfolgversprechend erscheint. Der Zugang verallgemeinert bereits bestehende Algorithmen, die sich in der nichtlinearen optimalen Steuerung als sehr effizient erwiesen

haben und insbesondere zur Bahnoptimierung bei Industrierobotern eingesetzt wurden [9, 10, 11].

Die üblichen primalen und dualen Dekompositionsmethoden zerlegen das mehrstufige Optimierungsproblem in kleinere Optimierungsprobleme, die den Knoten des Szenario-Baumes zugeordnet sind. Die lokalen Probleme erzeugen für ihre Nachbarn Schnittebenen und damit Kopplungsbedingungen, die iterativ gelöst werden.

Der neue Ansatz behandelt das Optimierungsproblem global durch Innere-Punkt-Methoden und nutzt die Struktur des Szenario-Baumes auf der Ebene der linearen Algebra durch rekursives Lösen der linear indefiniten KKT-Systeme. Bei iterativer Behandlung der Ungleichungsrestriktionen wird hier die Kopplung der einzelnen Knoten stets explizit berücksichtigt.

Der Algorithmus ist in einer ersten Version als Klassenbibliothek in C++ implementiert und wurde erfolgreich zur Lösung konvex-quadratischer finanzmathematischer Probleme (mehrstufiger Markowitz-Ansatz) mit mehreren hunderttausend Variablen eingesetzt. Die Resultate werden in Kürze publiziert [12].

Zuverlässigkeitskenngrößen eines komplexen monotonen Systems mit Reparatur

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin)

Förderung: BMW Rolls-Royce GmbH (Dahlewitz)

Ein technisches System bestehe aus unterschiedlichen Komponenten, die eine zufällige exponentialverteilte Lebensdauer haben, wobei die Ausfallrate der einzelnen Komponenten bekannt sei. Jede der Komponenten werde zu den gleichen Zeitpunkten $i, i=1,2,\dots$, überprüft, wobei d eine vorgegebene Intervalllänge ist. Bei einer Überprüfung am Ende der Zeitintervalle $((i-1)d, id]$ wird ein vorhandener Ausfall einer Komponente mit einer von der Komponente abhängenden Wahrscheinlichkeit entdeckt und behoben. Der Ausfall- und Fehlerentdeckungsmechanismus sei für die einzelnen Komponenten stochastisch unabhängig.

Der Zustand des komplexen technischen Systems ergibt sich aus den Zuständen der einzelnen Komponenten und der Strukturfunktion, die den Zustandsvektoren, in denen das System intakt ist, den Wert 1, und den Zustandsvektoren, in denen das System ausgefallen ist, den Wert 0 zuordnet. Es wird vorausgesetzt, daß das System monoton ist, d.h., daß bei Ausfall einer Komponente das System nicht besser wird. Die Strukturfunktion kann auf verschiedene Weise gegeben sein, z.B. in arithmetischer Darstellung oder durch die minimalen Schnitt- oder Pfadmengen.

Geht man davon aus, daß sich die einzelnen Komponenten im stationären Regime befinden, was nach einer längeren Laufzeit der Komponenten näherungsweise der Fall ist, so befindet sich das technische System im statistischen Gleichgewicht. Von besonderem Interesse ist die stationäre Wahrscheinlichkeit p , daß in dem Intervall $(0, d]$ ein Systemausfall auftritt. Aufgrund der Stationarität ist p natürlich auch die Wahr-

scheinlichkeit eines Systemausfalls in einem fixierten Intervall $((i-1)d, id]$ und gleich der Wahrscheinlichkeit, daß am Ende eines fixierten Intervalls $((i-1)d, id]$ das System durch Reparatur vom ausgefallenen in den intakten Zustand übergeht. Die Größe p/d entspricht der Ausfallintensität des Systems. Für größere und hoch zuverlässige Systeme (z.B. Flugzeugturbinen) erfordert die präzise Berechnung dieser Wahrscheinlichkeit aufgrund der Komplexität insbesondere auch schnelle und numerisch stabile Algorithmen. Derartige Algorithmen wurden für BMW Rolls-Royce entwickelt und implementiert.

Dekompositionsmethoden für stochastische ganzzahlige Programme

Bearbeitet von: Heidi Bachmann, Rüdiger Schultz, Regina Urbaniak, Robert Weismantel

Kooperationspartner: Claus C. Carøe (University of Copenhagen, Dänemark); Leen Stougie (Eindhoven University of Technology, Niederlande); Maarten H. van der Vlerk (University of Groningen, Niederlande)

Förderung: Siemens AG; Gerhard-Hess-Preis der DFG, verliehen an Robert Weismantel; DFG-Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“

Stochastische Optimierungsaufgaben besitzen eine charakteristische Blockstruktur, die Ausdruck der Verkopplung szenarioabhängiger Teilprobleme vermittelt (gewisser Informations-Nebenbedingungen (Nichtantizipativität) ist. Je nach Komplexität des stochastischen Programms (zwei- bzw. mehrstufig) ist diese Verkopplung mehr oder weniger kompliziert. Für stochastische Optimierungsaufgaben mit Ganzzahligkeitsforderungen gibt es in der Literatur nur vereinzelte algorithmische Ansätze.

Ausgehend von einer Lagrange-Relaxierung der Informations-Nebenbedingungen haben wir in [2] einen allgemeinen algorithmischen Ansatz für zwei- und mehrstufige stochastische ganzzahlige Programme entwickelt. Dieser Ansatz wurde in [1] auf ein reales zweistufiges stochastisches Programm aus der Kraftwerkseinsatzoptimierung zugeschnitten und implementiert. Testrechnungen lieferten Lösungen der stochastischen Programme mit Gütezertifikaten im unteren Prozent- bis Promillebereich.

Im mehrstufigen Fall erfordert die Umsetzung des Ansatzes aus [2] weitergehende Untersuchungen im Hinblick auf die effiziente algorithmische Handhabung der Informations-Nebenbedingungen. Erste diesbezügliche Arbeiten befassen sich mit einem Produktionsplanungsproblem der Siemens AG.

Nach Entkopplung der Informations-Nebenbedingungen zerfallen stochastische ganzzahlige Programme in Teilprobleme, die sich nur in Zielfunktion und rechter Seite, nicht aber in der Matrix der Nebenbedingungen unterscheiden. Testmengen-Methoden der ganzzahligen linearen Optimierung nutzen solche Struktureigenschaften aus. Gegenwärtige Untersuchungen zielen daher auf die Einbeziehung von Testmengen-Verfahren in den allgemeinen Ansatz aus [2]. Obgleich klar ist, daß Testmengen-Verfahren bisher noch nicht für hochdimensionale Aufgaben nutzbar sind, haben unsere Testrechnungen für Modelle mit Teilproblemen von behandelbarer Größe erhebliche

Beschleunigungen des allgemeinen Verfahrens aus [2] angezeigt.

Ein alternativer Dekompositionsansatz für zweistufige ganzzahlige stochastische Programme wurde in [8] ausgearbeitet. Grundidee ist dabei die Aufspaltung des Problems nach Zeitstufen. Dies führt erneut auf Teilprobleme mit Ähnlichkeitseigenschaften. Zur Lösung der Teilprobleme werden Testmengen-Verfahren benutzt, die auf Gröbner-Basis-Methoden beruhen. Als neue Schwierigkeit tritt bei diesem Dekompositionsansatz aber ein diskontinuierliches Masterproblem auf, zu dessen Lösung bisher nur sehr grobe Enumerationsstrategien bekannt sind.

Publikationen

- [1] C.C. Carøe, A. Ruszczyński und R. Schultz, *Unit commitment under uncertainty via two-stage stochastic programming*, in: C.C. Carøe, D. Pisinger (eds.), Proceedings NOAS'97, Technical Report DIKU-TR-97/23, Department of Computer Science, University of Copenhagen 1997.
- [2] C.C. Carøe und R. Schultz, *Dual decomposition in stochastic integer programming*, revidiertes Manuskript 1997, eingereicht bei Operations Research Letters.
- [3] D. Dentcheva, R. Gollmer, A. Möller, W. Römisches und R. Schultz, *Solving the unit commitment problem in power generation by primal and dual methods*, in: M.P. Bendsøe, M.P. Sørensen (eds.), Progress in Industrial Mathematics at ECMI 96, Teubner, Stuttgart, 1997, 332–339.
- [4] D. Dentcheva und W. Römisches, *Optimal power generation under uncertainty via stochastic programming*, erscheint in: K. Marti (ed.) "Stochastic Optimization", Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer-Verlag.
- [5] M. Fischer, *Gestaffelte Brennstoffpreise in der Kraftwerkseinsatzoptimierung*, Diplomarbeit, TU Berlin, 1997.
- [6] R. Gollmer, A. Möller, W. Römisches, R. Schultz, G. Schwarzbach und J. Thomas, *Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung der VEAG*, in: VDI-Berichte **1352** zur Fachtagung „Optimierung in der Energieversorgung II“, 1997, 71–85.
- [7] M. Nowak und W. Römisches, *Optimal power dispatch via multi-stage stochastic programming*, in: M.P. Bendsøe, M.P. Sørensen (eds.), Progress in Industrial Mathematics at ECMI 96, Teubner, Stuttgart, 1997, 324–331.
- [8] R. Schultz, L. Stougie und M.H. van der Vlerk, *Solving stochastic programs with complete integer recourse by enumeration: A framework using Gröbner basis reductions*, erscheint in Mathematical Programming.
- [9] M.C. Steinbach, *Fast recursive SQP methods for large-scale optimal control problems*, Dissertation, Universität Heidelberg, 1995.

- [10] M.C. Steinbach, *Structured interior point SQP methods in optimal control*, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), **76(3S)** (1996), 59–62.
- [11] M.C. Steinbach, H.G. Bock, G.V. Kostin und R.W. Longman, *Mathematical Optimization in Robotics: Towards Automated High Speed Motion Planning*, Preprint SC 97–03, ZIB, 1997, erscheint in Surveys on Mathematics for Industry.
- [12] M.C. Steinbach, *Back to the roots: recursive optimization on dynamic trees*, in Vorbereitung.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Folkmar A. Bornemann

- Ruf auf den Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen, TU München (Nachfolge R. Bulirsch).

Wolfram Koepf

- Ruf auf eine C2–Professur an den Fachbereich Informatik, Mathematik und Naturwissenschaften der Hochschule (FH) für Technik, Wirtschaft und Kultur, Leipzig, angenommen zum 01.09.1997.

Rüdiger Schultz

- Ruf auf eine C3-Professur für „Diskrete Mathematik“ am Mathematischen Institut der Universität Leipzig, angenommen zum 01.10.1997.

Robert Weismantel

- Gerhard-Hess-Forschungsförderpreis 1997 der DFG.

3 Wissenschaftliche Dienstleistungen

3.1 Überblick

Nachfolgend wird für die Wissenschaftlichen Dienstleistungen des ZIB in den Bereichen

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen (Museumsprojekt)
- Informationssysteme für die Wissenschaftliche Visualisierung (Infovis)
- WWW-Labors für numerische Software
- Computeralgebra

ein Überblick über die Schwerpunkte gegeben.

KOBV: In den wissenschaftlichen Bibliotheken der Bibliotheksregion Berlin-Brandenburg gibt es über 40 Millionen Bücher, ein “Schatz” des Wissens, der sich in seiner Bedeutung mit den Beständen der größten Bibliotheken der Welt vergleichen läßt. Würde man diese Bücher hintereinander aufstellen, so könnte diese “Bücherschlange” Berlin und Paris (über 1000 km) miteinander verbinden.

Nun sind diese Bücher aber in über 800 Bibliotheken der Region verteilt. Hätten alle etwa einen gleich großen Bestand, so würde jede Bibliothek 50.000 Bände beherbergen. Und ein Leser, der ein bestimmtes Buch sucht, müßte ziemlich weite Wege gehen und viele Kataloge durchsuchen, die meisten davon wohl ohne Erfolg. In der Praxis wird unser Leser also bei “seiner” Heimatbibliothek bleiben, etwa bei der Fachbibliothek seines Instituts oder — wenn er Glück hat und einen Platz zum Arbeiten bekommt — in den Räumlichkeiten der Staatsbibliothek zu Berlin Preußischer Kulturbesitz.

Die Grundidee des KOBV ist es, die Kataloge aller dieser Bibliotheken durch eine Suchmaschine zu einem einzigen großen — aber virtuellen — Katalog zusammenzufassen, in dem ein Leser suchen kann, bevor er sich irgendwohin auf den Weg macht. Dazu müssen natürlich die “Bibliotheken an das Netz”, genauer an das Internet bzw. ins World Wide Web, damit die “Virtuelle Bibliothek” der Region entstehen kann.

Math-Net: In diesem Projekt geht es weniger um “Katalogkarten”, sondern um die Dokumente selbst (Volltexte) und um elektronische “dokumentähnliche Objekte” wie z. B. Datensammlungen und Software, mathematische Darstellungen, dynamische Simulationen und Visualisierungen bis hin zu Planungen, Projektdarstellungen und “Zwischenergebnissen” aktueller mathematischer Forschung.

Besonderen Wert legen wir auf aktuelle und qualitativ hochwertige Informationsangebote, die von den beteiligten Institutionen mit "bibliographischen" Daten versehen werden sollen. Im Unterschied zum KOBV, wo Bibliotheken diese Information erstellen, sollen hier die Autoren selbst die Metadaten zu ihren Arbeiten bereitstellen. Zu diesem Zweck verwendet das Projekt den *Dublin Core* und entwickelt einfach zu benutzende Erfassungswerkzeuge. Das ZIB kooperiert mit acht mathematischen Fachbereichen, die ihre Erfahrungen in ihrer eigenen Region verbreiten werden.

Museumsprojekt: Diese Initiative hat ihren Schwerpunkt im Berliner Raum, es ist auch kein kooperatives (bzw. technisch gesprochen verteiltes) Projekt, jedoch ist es organisatorisch und technisch weiter fortgeschritten als die beiden oben genannten Vorhaben.

Hier entwickelt das ZIB im Auftrag zum Beispiel der Staatlichen Museen zu Berlin Preußischer Kulturbesitz und in Zusammenarbeit mit dem in Berlin beheimateten Institut für Museumskunde diverse Werkzeuge für die Rationalisierung der täglichen Arbeit in Museen, angefangen von der speziellen Datenbank für kleinere Museen bis hin zu integrierten Web-Servern für Multimediademonstrationen größerer Institutionen. Das bekannteste Beispiel hierfür ist der Server des Deutschen Historischen Museums, bei dessen Ausgestaltung wir auch inhaltlich mitgewirkt haben.

Das Projekt agiert im wesentlichen in der Art eines Consulting-Hauses im Softwarebereich, das die Museen bei der Einführung von EDV im traditionellen Sinne unterstützt, entsprechende Hilfsmittel entwickelt und dabei ganz konkrete Arbeiten übernimmt. Ob die Museen in Berlin (oder in Deutschland) den Zustand erreichen werden, in dem es sich lohnt, aus technischen Kooperationen Vorteile zu ziehen oder gar Verbände zu bilden, bleibt einstweilen noch ungewiß.

Infovis: Wie in vielen anderen wissenschaftlichen Bereichen besteht auch in der wissenschaftlichen Visualisierung der Bedarf nach fachbezogenen Informationssystemen. Dabei fallen neben bibliographischen Informationen insbesondere Bilder an, die neue bildbasierte Retrievalmethoden erfordern. Im Schwerpunkt „Informationssysteme für die Wissenschaftliche Visualisierung“ werden neben dem Aufbau eines Fachinformationssystems für die Visualisierung, mögliche Verbindungen von klassischen Methoden des Informationretrieval mit bildbasierten Retrievalmechanismen untersucht.

WWW-Labors für numerische Software: Um der wachsenden Bedeutung des WWWs gerecht zu werden, beschäftigt sich die Abteilung Wissenschaftliche Softwareentwicklung mit der Entwicklung von "virtuellen Labors" für numerische Software. Interessierten Nutzern, sowohl Anwendern aus allen Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften als auch Lernenden und Lehrenden aus dem Bereich der numerischen Mathematik, soll die Möglichkeit gegeben werden, moderne numerische Algorithmen in einfacher Weise kennenzulernen und auch vergleichen zu können.

Computeralgebra: Im Bereich der Forschung und der Entwicklung von Produkten lag das Hauptaugenmerk der Arbeiten auf der Integration des Internet (insbesondere des World Wide Webs). Durch die Verwendung der Dienste des WWW können die neuesten Forschungsergebnisse, z.B. Algorithmen für orthogonale Polynome, sofort weltweit zur Verfügung gestellt werden. Auf einigen Serversystemen werden Implementierungen dieser Algorithmen als Subsystem bereitgestellt und sind dann für Interessenten verwendbar. Für die Produkte der Abteilung bietet das WWW darüber hinaus die Möglichkeit einer Präsentation sowie einer automatischen Verteilung neuer oder korrigierter Module.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Barbara Rusch, Josef Willenborg

Kooperationspartner: Universitätsbibliotheken der FU Berlin, der HU Berlin und der TU Berlin, Bibliothek der Hochschule der Künste Berlin, Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Universitätsbibliotheken der BTU Cottbus, der Europa-Universität Viadrina Frankfurt (Oder) und der Universität Potsdam, Bibliotheken der Fachhochschulen in Brandenburg

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin; Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg (voraussichtlich ab 1998)

Im Januar 1997 hat die Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin das ZIB beauftragt, sich am Aufbau der künftigen Informationsstrukturen in Berlin und Brandenburg zu beteiligen, und M. Grötschel die Leitung für das dreijährige Projekt "Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)"¹ übertragen. Die Grundlage für den KOBV bilden die Empfehlungen einer unabhängigen Expertengruppe [1] und das gemeinsame Landeskonzept der Länder Berlin und Brandenburg (derzeit Referentenentwurf) [2].

Mit dem KOBV-Projekt wird das ZIB ein neuartiges, zukunftsweisendes Verbundkonzept realisieren, das auf dem Internet aufbaut: Kern des Modells ist eine Suchmaschine, die für die eigenständigen lokalen Systeme einen virtuellen Union-Catalog realisiert, der auch als virtueller Katalog für Nutzer und Bibliothekare im Netz ansprechbar ist. Zentral wird die Suchmaschine mit Fremd- und Normdaten bereitgestellt [3].

Im Februar 1997 hat sich das KOBV-Steuerungsgremium konstituiert, das die Leitlinien für den Verbund festlegt. Ihm gehören die Staatssekretäre der Länder Berlin und Brandenburg, die Mitglieder der Expertengruppe, der Projektleiter und die Leiter der beteiligten Bibliotheken an.

¹<http://elib.zib.de/kobv>

Im ersten Halbjahr 1997 hat das ZIB die Grundlagen geschaffen, um die zentralen Komponenten bis Ende 1997 in ihren Grundfunktionen einsatzfähig zu haben. So haben leitende Bibliothekare aus der Region gemeinsam mit dem ZIB die lokalen Anforderungen an den Verbund definiert [4]. Die in diesem Zusammenhang von FU, HdK, HU, TU und dem ZIB im April 1997 gestellten HBFG-Anträge auf lokale Bibliothekssysteme und Hardware für die Suchmaschine haben die DFG und der Wissenschaftsrat inzwischen positiv entschieden.

Nach ihrem Einsetzen hat die zentrale Projektgruppe den WWW-Server des KOBV und das Testsystem aufgebaut. Unter Beteiligung von Bibliothekaren aus Berlin und Brandenburg sind die Anforderungen an die Suchmaschine [5], an die Schnittstelle von Suchmaschine und Lokalen Systemen [6] spezifiziert, eine Strategie für die Nutzung von Fremddaten erarbeitet [7] und ein Modell für den KOBV-Normdatenverbund entwickelt [8] worden.

Die Kanzler der o. g. Hochschulen legten Mitte 1997 mit ihrer Entscheidung, die Beschaffung eines einheitlichen Bibliothekssystems und der Suchmaschine über ein gemeinsames europaweites Ausschreibungsverfahren vorzunehmen, neue Grundlagen.

Von Anfang an hat die Projektgruppe die Ziele des KOBV in der bibliothekarischen Öffentlichkeit bekannt gemacht, um die Akzeptanz für diese neue Art der regionalen bibliothekarischen Zusammenarbeit zu erhöhen. Sie hat dazu zahlreiche Informationsveranstaltungen durchgeführt, potentielle Teilnehmer beraten und Kontakte zu deutschen Verbänden und bibliothekarischen Institutionen aufgenommen. Ende Oktober 1997 hat das ZIB gemeinsam mit dem Referat für Weiterbildung der FU Berlin einen Workshop in der Staatsbibliothek zu Berlin veranstaltet, an dem über 500 Bibliothekare teilgenommen haben.

Bereits in der Projektphase ist der KOBV in überregionalen bibliothekarischen Gremien (wie Konferenz für Regelwerksfragen, Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme) und Initiativen (z. B. zur Erschließung von Internet-Ressourcen, Online-Schnittstelle für Normdaten) aktiv, um die Entwicklungen in den Bibliotheken zu verfolgen und sich an den derzeitigen Entwicklungen des Bibliothekswesens zu beteiligen.

Publikationen

- [1] B. Dugall, M. Hebgen, W. König: *Empfehlungen zur zukünftigen Struktur der Informationssysteme der wissenschaftlichen Bibliotheken des Landes Berlin unter Berücksichtigung der wissenschaftlichen Bibliotheken des Landes Brandenburg.* (1997)
- [2] *Zur zukünftigen Informationsstruktur der Bibliotheksregion Berlin-Brandenburg: Gemeinsame Planungen der Berliner Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur und des Ministeriums für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg.* In: *Weitblick*, H. 1/2 (1997)
- [3] J. Lügger: *Wo ist der OPAC der virtuellen Bibliothek? Strukturen des Kooperati-*

ven Bibliotheksverbundes. Technical Report TR 97–10, ZIB, 1997.

- [4] J. Lügger (Redaktion): *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin–Brandenburg: Lokale Konzepte und technische Schnittstellen*. Technical Report TR 97–14, ZIB, 1997.
- [5] J. Willenborg: *Die Suchmaschine des KOBV — Spezifikation der Anforderungen*. Technical Report TR 97–13, ZIB, 1997.
- [6] M. Kuberek, St. Lohrum: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Schnittstelle Lokalsysteme-Suchmaschine, Spezifikation der Anforderungen*. Technical Report TR 97–11, ZIB, 1997.
- [7] B. Rusch: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Strategien zur Nutzung von Fremddaten*. Technical Report TR 97–15, ZIB, 1997.
- [8] M. Kuberek: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Normdaten im KOBV*. Technical Report TR 97–12, ZIB, 1997.

3.2.2 Verteiltes Informationssystem für die Mathematik in Deutschland

Aus den Bestrebungen der vergangenen Jahre, ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik in Deutschland aufzubauen, sind eine Reihe von Projekten und Initiativen am ZIB und in vielen anderen Instituten, Fachbereichen und wissenschaftlich Bibliotheken entstanden (siehe [1], [2]), von denen das ZIB mit dem Math-Net den organisatorisch/technischen Kern realisiert.

In den Rahmen dieser Zielvorstellungen läßt sich neben der elektronischen Bibliothek *elib* des ZIB auch die Realisierung eines Konferenzservers für den internationalen Kongreß ICM '98 der *International Mathematical Union* (IMU) einordnen. Diesen Weltkongreß der Mathematik, der alle vier Jahre stattfindet, führt die IMU im August 1998 in Berlin unter wesentlicher Beteiligung des ZIB durch: M. Grötschel ist der Präsident des Organisationskomitees dieses Kongresses.

Alle in diesem Zusammenhang stehenden IuK-Projekte in der Mathematik entwickeln Methoden und Werkzeuge, die auch für andere wissenschaftliche Fachrichtungen von Interesse sind; gleichermaßen kann die Mathematik auch von den Erfahrungen der anderen Fächer profitieren. Solche spezifischen und entsprechende Querschnittsaktivitäten zu fördern und zu koordinieren, ist der Sinn der gemeinsamen IuK-Initiative der wissenschaftlichen Fachgesellschaften [7].

Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Joachim Lügger, Wolfram Sperber, Michael Walter, Vincent Winczewski

Kooperationspartner: Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), IuK-Fachgruppe der DMV, Konferenz der mathematischen Fachbereiche (KMathF), die mathematischen Fachbereiche der Universitäten Chemnitz, Halle, Kaiserslautern, Köln, München, Paderborn, Osnabrück, Rostock, Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen (SUB-Göttingen), Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ-Karlsruhe) mit dem Zentralblatt für Mathematik (ZfM), mathematische Fachbereiche an Universitäten und mathematische Forschungsinstitute in Deutschland

Förderung: DFN-Verein mit Mitteln der Deutschen Telekom AG

Im Dezember 1996 erhielten das ZIB und acht mathematische Fachbereiche vom DFN-Verein die Zusage, im Rahmen eines Förderprogramms der Deutschen Telekom AG einen kommunikationstechnischen Kernbestandteil des verteilten Informationssystems zu realisieren, die "Informationsdienste für die Mathematik im Internet", ein kooperatives Projekt unter der Leitung von M. Grötschel mit einer Laufzeit von zwei Jahren [3]. Das Projekt begann im Januar 1997.

Das Math-Net-Projekt dient dem Aufbau eines nutzergesteuerten und effektiven elektronischen Informations- und Kommunikationssystems im Bereich der Mathematik.

Das Math-Net ist ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik. Es basiert auf lokalen Informationsangeboten der Fachbereiche im WWW bzw. im Internet, die im Math-Net integriert, nutzerfreundlich aufbereitet und zugänglich gemacht werden sollen. Das Math-Net soll durch die freiwillige Mitarbeit weiterer Institutionen ausgebaut werden. Die am Projekt beteiligten Institutionen koordinieren und integrieren die mathematischen Institutionen in ihrer Region bezüglich der IuK-Angebote und unterstützen sie beim weiteren Aufbau eines qualitativ hochwertigen lokalen Informationsangebotes.

Durch den Abschluß von Kooperationsvereinbarungen mit der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, mit der Konferenz der Mathematischen Fachbereiche und dem Zentralblatt für Mathematik ist das Projekt zudem in die entsprechenden Zielsetzungen der für die Mathematik wichtigen nationalen wissenschaftlichen Verbände und Organisationen eingebettet und erhält durch sie die notwendige fachliche Unterstützung.

Informationen zu folgenden Bereichen sollen im Projekt von den mathematischen Fachbereichen und Institutionen gesammelt, erschlossen und aufbereitet werden:

- Preprints (incl. technischer Reports und Publikationsreihen)
- Mathematische Software und wissenschaftliche Datensammlungen
- Materialien zur Lehre
- Materialien zur Forschung

- Materialien zur Infrastruktur und zum Service

Die Beschreibung der Ressourcen soll - so weit wie möglich - auf dem *Dublin Core* Metadatenkonzept [4] aufsetzen. Metadaten existieren in verschiedenen Formen, z. B. zur Katalogisierung der Bestände von Bibliotheken. *Dublin Core* beschränkt sich auf einen Minimalumfang von Kategorien (derzeit gibt es 15 Kategorien). Dieses nutzerorientierte Konzept erlaubt auch dem Nichtspezialisten, z. B. dem Autor eines Preprints, eine relativ präzise Beschreibung seiner Daten.

Ein einheitliches Metadatenkonzept soll auch die Grundlage für eine effiziente Suche liefern. Der Nutzer kann nach verschiedenen Metadaten gezielt suchen und die verschiedenen Metadatenkategorien logisch verknüpfen. Oder anders ausgedrückt: Die Metadaten schaffen die Voraussetzungen für eine mehrdimensionale Suche im Informationsraum, der durch Daten und Metadaten erzeugt wird.

In Kombination mit geeigneten Such- und Indexierungswerkzeugen eröffnet dieses Vorgehen gleichzeitig die Möglichkeit zur verteilten Suche über die gesamten in ihrer Struktur heterogenen elektronischen Datenbestände der teilnehmenden Einrichtungen. Dabei wird durch den Metadatenansatz insbesondere auch eine spezifische Suche, z.B. ausschließlich nach Preprints, ermöglicht, wobei andere Bereiche bei der Suche quasi ausgeblendet werden können.

Informationsserver der IMU, des ICM'98 und der Math-Net Links

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Michael Walter, Vincent Winczewski

Kooperationspartner: Executive Committee der International Mathematical Union (IMU), Organisationskomitee des International Congress of Mathematicians Berlin 1998 (ICM'98), European Mathematical Society (EMS) und Zentralblatt für Mathematik (ZfM)

Sowohl der Informationsserver der *International Mathematical Union* (IMU) (<http://elib.zib.de/IMU>), als auch der für den 1998 in Berlin stattfindenden *International Congress of Mathematicians* (ICM'98) (<http://elib.zib.de/ICM98>), sind im Berichtszeitraum erheblich ausgebaut und aktualisiert worden. Durch eine Kooperation mit dem Zentralblatt für Mathematik und der *European Mathematical Society* ist es gelungen, beide Server in über 30 Ländern auf allen Kontinenten zu spiegeln. Damit ist eine bestmögliche Verbreitung und Verfügbarkeit gewährleistet.

Der IMU-Server dient weiterhin als globaler Einstiegspunkt zu elektronischen mathematischen Informationsangeboten in aller Welt. Über ihn sind auch die *Math-Net Links to the Mathematical World*² erreichbar, eine virtuelle Bibliothek mathematischer Ressourcen.

Erhebliche Anstrengungen hat das Projekt bei der elektronischen Aufbereitung und Er-

²<http://elib.zib.de/Math-Net/Links/math.html>

fassung von Daten unternommen, die für die Konferenzabwicklung von Bedeutung sind. Hierunter fällt die Verschickung des *Second Announcement*, die Bereitstellung von Mailingverteilern und die gesamte Online-Registrierung. Der Einsatz von Datenbanken bildet dabei eine wichtige Voraussetzung, bedeutet aber auch einen zusätzlichen Betreuungsaufwand.

Elektronische Informationsangebote der Mathematik

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Joachim Lügger

Kooperationspartner: R.F. Boisvert (NIST), E. Grosse (Bell Labs, Murray Hill, USA), Fachgruppen "Numerische Software", "Optimierung" und "Stochastik" der DMV

Mit der elektronischen Bibliothek *eLib*, einem inzwischen sehr umfangreichen Angebot von aktueller Forschungssoftware, Datensammlungen und Dokumenten aus allen Bereichen der Mathematik, stellt die Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* einen Service für Mathematiker und deren Anwender bereit.

Technische Basis der *eLib* ist ein Hyper-G/HyperWave-Server [5], in den auch die Server der IMU und des ICM'98 integriert sind. Die (mit 1,5 Gigabyte und über 25.000 Softwaremodulen) sehr umfangreiche Netzbibliothek *netlib* [6] mathematischer Softwarebibliotheken ist im Berichtszeitraum in einem Prototyp mit *Dublin Core* Metadaten realisiert. Damit sind die Voraussetzungen für die Integration der gesamten *netlib* in das Math-Net und die darauf aufbauenden Querschnittsdienste gegeben.

Eine Vielzahl von elektronischen Diskussionslisten für eine Reihe von Fachgruppen der DMV werden von der Abteilung unter dem Einsatz des Mailverteilers *Majordomo* betreut und zusätzlich in den *eLib*-Server integriert, so daß die Beiträge automatisch in absuchbaren Archiven abgelegt werden (<http://elib.zib.de/Math.econf>).

Weitere fachspezifisch ausgerichtete Informationssysteme werden z.B. durch die Abteilung *Scientific Visualization* (siehe Seite 105) bereitgestellt.

Kooperation wissenschaftlicher Fachgesellschaften

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Joachim Lügger, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), Deutsche Gesellschaft für Erziehungswissenschaften (DGfE), Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG), Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Deutsche Gesellschaft für Erziehungswissenschaften (DGfE), Deutsche Gesellschaft für Soziologie (DGS), Gesellschaft für Informatik (GI), Konferenz der Mathematischen Fachbereiche, Österreichische Mathematische Gesellschaft (ÖMG), European Mathematical Society (EMS), International Mathematical Union (IMU), Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen (SUB-Göttingen), SUBITO und SUBITO.2 Bund-Länder-Initiative, Zentralblatt für Mathematik (Abteilung Mathematik/Informatik des FIZ-Karlsruhe), Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. (ZKI-Verein)

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (betrifft nur einige Aktivitäten innerhalb der IuK-Initiative der Fachgesellschaften)

Die Kooperation innerhalb der gemeinsamen IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften wurde im vergangenen Jahr erfolgreich fortgesetzt. Das ZIB, vertreten durch Martin Grötschel und die Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme*, koordiniert die entsprechenden zahlreichen Aktivitäten in der Mathematik.

Zwei Aktivitäten sind besonders hervorzuheben. Die erste betrifft das von der DFG inzwischen genehmigte Projekt "Dissertationen Online". Die Mathematik wird hierbei den Teil bearbeiten, der sich mit Metadaten für die Dissertationen beschäftigt. Zum zweiten hat sich die Mathematik intensiv in die inhaltliche Diskussion und organisatorische Vorbereitung des vom BMBF geförderten Projekts *Global-Info* eingebracht. Mehrere mathematische Institutionen sind an erfolgreichen Vorprojekten beteiligt. Die DMV hat Experten benannt, die sich an der inhaltlichen und technischen Konzeption von *Global-Info* beteiligen.

Die Mathematik hat den gemeinsamen IuK-Workshop der Fachgesellschaften (Multimedia in den Wissenschaften, 03.-05. März in Würzburg) inhaltlich mitgetragen. Der zweite themenspezifische Workshops zu Metadaten (12.-15. Oktober in Osnabrück) wurde im wesentlichen von der Mathematik vorbereitet und organisiert. Martin Grötschel stellte auf dem ersten Workshop "Electronic Journals" der IuK-Initiative die Krise der Zeitschriftenversorgung in den Wissenschaften und mögliche Lösungsansätze dar.

Neben der Mitarbeit in der IuK-Initiative hat das ZIB die Kooperation mit Bibliotheken, der Abteilung Mathematik/Informatik des Fachinformationszentrums Karlsruhe (Zentralblatt für Mathematik) und den Rechenzentren im letzten Jahr wesentlich erweitert.

Dazu gehören der Abschluß von Kooperationsverträgen u.a. zwischen dem Math-Net-Projekt mit dem Zentralblatt für Mathematik und mit dem Math-Bib-Net-Projekt an der SUB Göttingen, aber auch die Entwicklung gemeinsamer Konzepte z.B. im Bereich der Informationsversorgung, gemeinsam mit Bibliotheken.

Die DMV hat - zusammen mit der ÖMG - eine Fachgruppe Information und Kommunikation gegründet, die sich für den Aufbau moderner Strukturen für die Information und Kommunikation in der Mathematik engagieren und die Aktivitäten koordinieren wird. W. Sperber ist zum Leiter der Fachgruppe gewählt worden.

Die Kooperation mit internationalen mathematischen Fachgesellschaften (EMS und IMU) wurde ebenfalls ausgebaut. Das ZIB arbeitet in den *Electronic Publishing Committees* der beiden Institutionen mit. Diese beiden Fachgesellschaften haben im vergangenen Jahr mit der Erarbeitung von Konzeptionen begonnen, die günstige Rahmenbedingungen für die weitere Entwicklung im IuK-Bereich in der Mathematik schaffen sollen. Die Erfahrungen des ZIB aus den bisherigen IuK-Projekten sind dabei wichtige Ausgangspunkte für die Diskussion.

Publikationen

- [1] M. Grötschel: *Der Weg der Mathematik in die Informationsgesellschaft: Teil I*
In: Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Heft 3/97. S. 48–57.
(1997)
- [2] M. Grötschel: *Der Weg der Mathematik in die Informationsgesellschaft: Teil II*
In: Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Heft 4/97. S. 43–48.
(1997)
- [3] W. Dalitz, M. Grötschel, G. Heyer, J. Lügger, W. Sperber: *Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)I*. Technical Report TR 96–13, ZIB, 1996.
- [4] *Dublin Core Metadaten Homepage*:³
- [5] W. Dalitz, G. Heyer: *HyperWave — The New Generation Internet Information System based on Hyper-G*. dpunkt Verlag, Heidelberg (1996)
- [6] W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger: *Information Services for Mathematics in the Internet (Math-Net)*. ZIB Preprint SC 97–25 (1997)
- [7] *Kooperationsvereinbarung der wissenschaftlichen Fachgesellschaften zur elektronischen Information und Kommunikation*.⁴

³http://purl.oclc.org/metadata/dublin_core

⁴http://elfikom.physik.uni-oldenburg.de/IuK/Koop_Vereinb/Koop_Vereinb.html

3.2.3 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: Carlos Saro, Beate Schröder, Krystyna Mader, Katrin Volkmann, Christian Zimmer

Kooperationspartner: Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IFM), Bayerisches Nationalmuseum (BNM), Deutsches Historisches Museum (DHM), Deutsches Hygiene Museum Dresden (DHMD)

Förderung: Robert–Bosch–Stiftung (bis Ende Februar 1997)

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

Da Vorhaben in diesem Bereich im allgemeinen auf größere Zeiträume ausgerichtet sind, erwarten die beteiligten Institutionen eine kontinuierliche Zusammenarbeit. So besteht zwischen dem ZIB und dem IFM bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Ein direkter Kooperationsvertrag mit dem Deutschen Hygiene Museum Dresden schloß sich an das im Berichtszeitraum abgeschlossene Pilotprojekt „Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern“ an. Weitere Kooperationen sind im Antragsstadium. Die Arbeitsgruppe finanziert sich im wesentlichen aus Drittmitteln.

Basissoftware für alle Projekte ist das von der britischen *Museum Documentation Association (MDA)* speziell für den Einsatz zur Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS. Es ermöglicht die Verarbeitung komplexer Informationsstrukturen und erlaubt dadurch die Beschreibung auch komplizierter Objektzusammenhänge ohne Informationsverlust. Durch den modularen Aufbau kann es leicht erweitert und an individuelle Bedürfnisse und neue technische Gegebenheiten angepaßt werden. Aus diesem Grund ist GOS auch im Studiengang Museumskunde an der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft (FHTW) Berlin im Einsatz, um exemplarisch Lösungswege für Probleme der Inventarisierung aufzuzeigen.

Im Berichtszeitraum standen auf die Praxis ausgerichtete Anwendungsprojekte im Vordergrund. Zudem stand das ZIB allen Kooperationspartnern auch in diesem Jahr durch die Pflege vorhandener Anwendungen und die qualifizierte Beratung zur Seite. Ende Februar dieses Jahres wurde das Projekt „Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern“ erfolgreich abgeschlossen. In Zusammenarbeit mit dem IFM und 15 Bezirks- und Regionalmuseen hat das ZIB Module entwickelt, die den „sanften“ Übergang von der papiergestützten Dokumentation zum computergestützten Sammlungsmanagement (*Collection Management System*) ermöglichen. Auf Basis der in der DDR verwendeten gemeinsamen Regelwerke und

Thesauri hat das Projekt eine standardisierte Anwendung entwickelt, welche den beteiligten Museen als Grundlage für hausinterne Objektverwaltung und übergreifenden Austausch dienen kann. Ähnlich ausgerichtete Projekte wurden auch mit anderen Kooperationspartnern durch-, bzw. weitergeführt, z. B. die Umsetzung der ursprünglich karteikartengestützten Standortverwaltung in eine Datenbankanwendung im BNM (etwa 150.000 Objekte).

Im DHM hat das ZIB verstärkt verwaltungstechnische Vorgänge in das bisher ausschließlich zur wissenschaftlichen Inventarisierung verwendete Datenbanksystem aufgenommen. Der Leihverkehr und die Standortverwaltung erfolgen nun ebenso über die Datenbank wie die Bearbeitung und Ausgabe von Inventarverzeichnissen und Inventarbuch. Das Inventarbuch wurde als Hypertext generiert und liegt nun auf CD-ROM vor. Für das DHM hat die Arbeitsgruppe auch in diesem Jahr wieder Internet-Applikationen erstellt. Das ZIB ergänzte die Funktionalität der WWW-Objektdatenbankschnittstelle um ein differenziertes Retrieval nach Datierungen, das sowohl exakte Angaben als auch Zeitspannen berücksichtigt. Nun können absolute, umschriebene und ungefähre Zeitspannen gesucht werden, wobei letztere in ihrer Spannweite in Abhängigkeit vom Bezugsdatum variieren. Auch die Problematik der Suche in unbekanntem Datenbeständen wurde angegangen: Auswahllisten geben Einblick in die Daten noch bevor die eigentliche Abfrage erstellt wird. Auf diese Weise werden wissenschaftliche Daten auch für Laien zugänglich gemacht. In der WWW-Objektdatenbank sind inzwischen 6 Abteilungen mit mehr als 60.000 Objekten und über 30.000 digitalisierte Bilder vertreten (<http://www.dhm.de/datenbank>). Sie wird pro Woche von etwa 200–300 Benutzern aus aller Welt angesprochen. Im Berichtszeitraum konzipierte und entwickelte das Projekt als neue Anwendung eine WWW-Schnittstelle zur Datenbank des Bildarchivs. Während der Datensuche kann ein „virtueller Warenkorb“ mitgeführt werden, um Archivbilder vorzumerken und online zu bestellen. Seit Beginn 1997 nimmt das DHM am EU-Projekt Musonet teil, das in Zusammenarbeit mit dem Ungarischen Nationalmuseum, dem Heimatmuseum Feldbach und dem Joanneum Research Graz stattfindet. Für dieses Projekt leistete das ZIB Vorarbeiten zur Anpassung des am DHM verwendeten Datenformates an die von der CIMI (*Consortium for the Computer Interchange of Museum Information*) entwickelte Z39.50-Schnittstelle.

Publikationen

- [1] H.-H. Clemens, C. Saro: *Abschlußbericht für das Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*. Technical Report TR 97-17, ZIB, 1997.
- [2] C. Saro, B. Schröder, K. Volkmann: *GOS Benutzer-Handbuch, Anleitung zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*. Technical Report TR 97-16, ZIB, 1997.
- [3] H.-H. Clemens: *Systemanalyse und Datenkatalog zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*. Techni-

cal Report TR 97–18, ZIB, 1997.

- [4] C. Wolters: *GOS Thesaurus–Handbuch zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*. Technical Report TR 97–19, ZIB, 1997.

3.2.4 Fachinformationssysteme für das Gebiet ‘Scientific Visualization’

Ziel dieses Schwerpunkts ist der Aufbau eines WWW-basierten Fachinformationssystems für das Gebiet ‘Scientific Visualization’. Angestrebt wird dabei eine Kollektion von Diensten – wie elektronische Bibliothek, Veranstaltungskalender, Sammlungen von Software und Testdatensätzen sowie „Nachrichtenticker“ – unter einer einheitlichen Nutzeroberfläche.

Bibliographische Informationssysteme

Bearbeitet von: Peter Müller, Daniel Limbach, Gerald Schmidt, Ingmar Decker, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Markus Dreger, Berlin

Förderung: DFN/BMBF, Microsoft, GmbH

Hauptschwerpunkt dieses Projekts ist die Konzipierung und Bereitstellung bibliographischer Informationsdienste, mit denen auf verschiedene Arten auf (online) Publikationen zugegriffen werden kann.

Im Jahr 1997 wurde eine elektronische Bibliothek zum Gebiet ‘Scientific Visualization’ (*Electronic Visualization Library*⁵, EVlib) implementiert. EVlib bietet neben den bibliographischen Angaben insbesondere den Zugriff auf Volltexte an. Dabei erfolgt das Hinzufügen neuer Dokumente durch die Nutzer selbst.

Die bibliographischen Angaben eines Dokuments werden in BibTeX-Einträgen gespeichert und zu BibTeX-Bibliographien zusammengefaßt. Damit sind sie von entsprechenden Suchdiensten⁶ sofort nutzbar. Zusätzlich wurde eine Schnittstelle für das Harvest-System geschaffen, das in anderen Fachinformationsprojekten (z. B. Math-Net (s. Kap. 3.2.2) eingesetzt wird.

Als weiterer Schwerpunkt erfolgte die Konzipierung eines Dienstes, um Nutzern das Anlegen von Kollektionen von Dokumenten über einen Dokumentenpool zu ermöglichen. Diese Kollektionen werden dann zur Relevanzbeurteilung neuer Dokumente genutzt.

Im Rahmen einer Kooperation mit Microsoft erfolgte eine Evaluierung von Microsoft-Produkten für die Erstellung und den Einsatz von Lernsoftware, zum Beispiel der LicFactory (siehe Produkte 6.2).

⁵<http://visinfo.zib.de/Library/>

⁶z.B. <http://liinwww.ira.uka.de/bibliography/>

Bildbasiertes Dokumenten-Retrieval

Bearbeitet von: Ingmar Decker, Peter Müller

Förderung: DFN/BMBF

Ziel dieses Projekts ist, einen „Query-by-Image“-Service für die oben beschriebene EVlib bereitzustellen und zu evaluieren. Dieser Dienst soll das Wiederfinden von Dokumenten anhand der in ihnen enthaltenen Bilder ermöglichen. Motiviert wird dieses Vorhaben durch die Beobachtung, daß sich Nutzer häufig an Abbildungen, weniger aber an formale Kriterien wie „Titel“ oder „Autor“ erinnern, oder daran interessiert sind, weitere Artikel mit ähnlichen Abbildungen zu finden.

Es wurde ein prototypisches WWW-Interface⁷ für den „Query-by-Image“-Service implementiert (Ausschnitt siehe Abb. 3.1). Die zugrunde liegende Bilddatenbasis wird aus Dokumenten der EVlib erzeugt. Zur Extraktion von Bildmerkmalen die dem Suchprozeß dienen, werden geeignete Methoden der Bildverarbeitung genutzt.

Das Interface ermöglicht zunächst das Browsen durch die Bilddatenbasis. Des weiteren dient es als Plattform für weitere Untersuchungen.

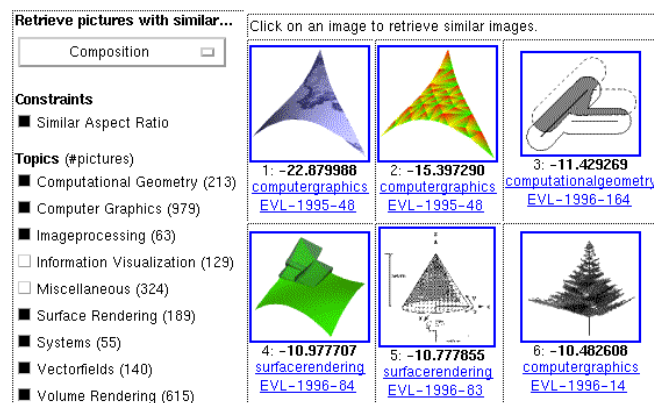


ABBILDUNG 3.1: Ausschnitt aus dem Bild-Browser-Interface der EVlib. Im rechten Teil werden die gefundenen Bilder und die dazugehörigen Dokumente angezeigt.

Publikationen

- [1] P. Ginsparg, *First Steps towards Electronic Research Communication*, *Computers in Physics* **8** (1994), no. 4, 390–396.
- [2] A. Gupta und R. Jain, *Visual information retrieval*, *Communications of the ACM* **40** (1997), no. 5, 71–79.
- [3] P. Müller und I. Decker, *The Electronic Visualization Library*, Tech. Report TR-97-09, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, ZIB, 1997.

⁷<http://visinfo.zib.de/imgdb/>

3.2.5 WWW-Labors für numerische Software

Bearbeitet von: Susanna Gebauer, Ulrich Nowak, Uwe Pöhle, Lutz Weimann

Kooperationspartner: W. Hackbusch, J. Burmeister (Universität Kiel), Fachgruppe “Numerische Software” der DMV, GAMM und GI

Bestärkt durch die positive Resonanz bei den Hamburger Sommerschulen “Numerische Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen” und “Nichtlineare Systeme”, wurden die Arbeiten zur Erstellung virtueller Labore für numerische Software fortgeführt. Ein Ziel des Projektes ist es, interessierten Nutzern von hochentwickelten Lösungsverfahren einen leichten Einstieg in die Verwendung derartiger Codes zu ermöglichen. Der zweite wesentliche Aspekt betrifft die Unterstützung der Numerik-Ausbildung in der Lehre. Die Erstbenutzung der Software wird durch graphische Benutzeroberflächen erleichtert und neben der Darstellung der Lösung an sich, kann auch das Verhalten der Algorithmen durch Darstellung wichtiger Kenngrößen, wie etwa Schrittweiten, wahrer Fehler oder benötigte Rechenzeit, transparent gemacht werden.

Um einen einfachen, plattformunabhängigen Zugang für die Nutzer zu gewährleisten, sind erste Komponenten der Benutzeroberflächen im WWW mittels html-forms realisiert. Sobald die gängigen Web browser zumindest JAVA 1.1.3 unterstützen, sollen auch Java-Applets eingesetzt werden, da die html-forms nur beschränkte Gestaltungsmöglichkeiten bieten.

Im Berichtszeitraum konnte eine verbesserte Version des NLEQ1Labs bereitgestellt werden. Wichtigste Neuerung war die Entwicklung eines Quasi-Compilers, der es nun erlaubt, einfache, benutzerdefinierte Funktionen zu verarbeiten.

Daneben wurde intensiv an der Entwicklung eines Labors für numerische Differentialgleichungslöser (ODELab) gearbeitet. Eine erste Vorversion steht bereits zur Verfügung⁸. Im Rahmen dieses Teilprojektes wurde auch ein Testrahmenprogramm für DG-Löser entwickelt, mit dem praktisch alle derzeit gängigen Verfahren in einem einheitlichen Rahmen für Vergleichsrechnungen zur Verfügung stehen.

Publikationen

- [1] U. Nowak, S. Gebauer: *A new Test Frame for Ordinary Differential Equation Solvers*. Preprint SC 97-68, ZIB, 1997.

⁸<http://galois.zib.de:8001/public/odelab/>

3.2.6 REDUCE

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Wolfram Koepf

Kooperationspartner: Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), James H. Davenport und John P. Fitch (University of Bath, England), Arthur C. Norman (Cambridge, England), Eberhard Schrüfer (GMD, Bonn), Marc Gaëtano, Claude Huchet (INRIA, Sophia–Antipolis, Frankreich), Andreas Dolzmann, Thomas Sturm (Universität Passau), 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 electronic Mail abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweiten Update). Die Umstellung des Systems zu einem weltweit verteilten Computerabgebrasystem wurde im Berichtszeitraum im wesentlichen fertiggestellt und von den REDUCE Entwicklern erprobt. Dieses Entwicklungs- und Distributionsverfahren ist web-orientiert ist und wesentlich flexibler als das traditionelle, ftp-basierte, nicht automatische Verfahren (mit patches.red). Es ermöglicht insbesondere, daß neue Algorithmen und Korrekturen 'sofort' automatisch und weltweit verteilt werden können. Ein Zugang von REDUCE zu Java ist ebenfalls in Entwicklung.

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

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

http://www.rand.org/software_and_data/reduce

oder <http://www.zib.de/Symbolik/reduce>

Die Information wird im wesentlichen an der Universität zu Köln, am ZIB und bei RAND Corp. gepflegt. An der Umstellung der gesamten Information auf HTML wird gearbeitet.

Der am ZIB installierte *Testserver im WWW*, der die Möglichkeit zum Benutzen und Testen des Systems gibt, wurde gut angenommen.

Im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft geförderten Projekts **OpenMath** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Erste Prototypen (einschließlich eines REDUCE-OM Prototyps) wurden in Zusammenarbeit mit Kollegen von INRIA Sophia–Antipolis im ZIB erstellt und auf den OpenMath Workshops präsentiert.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 60.000,- DM erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat neben den Upgrades für die neue

Version (seit Herbst 1995) die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegsversion, die bei einem Preis von 99 \$ (bzw 79 \$ für Upgrades) auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht.

Publikationen

- [1] H. Böing, W. Koepf, *REDUCE Package for the Indefinite and Definite Summation of q -hypergeometric Terms*. Technical Report TR 97-04, ZIB, 1997.

4 Rechenzentrum

4.1 Überblick

Das Rechenzentrum hat folgende Aufgaben:

- Betrieb und Ausbau des Landeshöchstleistungsrechners als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV),
- Unterstützung der Forschungsarbeit des ZIB durch Planung, Beschaffung und Erhaltung der Ausstattung mit Software und Geräten der Kommunikations- und Informationstechnik,
- Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet der angewandten Informatik.

Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des Rechenzentrums sind grundsätzlich an die Serviceaufgaben gebunden. Entsprechend der forschungspolitischen Schwerpunktsetzung des Landes Berlin im Informations- und Kommunikationsbereich bildet das High Performance Scientific Computing (HPSC) einen wichtigen Arbeitsschwerpunkt im ZIB. Teilgebiete sind die Rechnernetztechnik, die wissenschaftliche Visualisierung, die Algorithmen zur Behandlung komplexer mathematischer Modelle, die Modellierung, die Programmierung und Programmoptimierung für Höchstleistungsrechner und der Betrieb von (verteilten) Höchstleistungssystemen. In allen diesen Teilgebieten leistet das ZIB eigene Beiträge und arbeitet national und international mit anderen Institutionen und Forschern zusammen. In diesem Kapitel wird über den Anteil des Rechenzentrums an den HPSC-Aktivitäten des ZIB berichtet.

Die Leistung des Berliner Landeshöchstleistungsrechnersystems konnte mit der Inbetriebnahme des massiv-parallelen Rechners CRAY T3E im Februar mehr als verdoppelt werden. In den folgenden Abschnitten wird näher darauf eingegangen.

Im Rechenzentrum fanden in diesem Berichtszeitraum entscheidende Personalveränderungen statt: Sowohl der Bereichsleiter Rechenzentrum, Herr Jürgen Gottschewski, als auch der Leiter der Abteilung Interne Rechenzentrumsdienste, Herr Georg Kujawa, haben nach jahrzehntelanger Tätigkeit im ZIB bzw. seiner Vorgängereinrichtung Großrechenzentrum für die Wissenschaft in Berlin (GRZ) ihr berufliches Wirken beendet und sind aus dem aktiven Berufsleben ausgeschieden.

Mit Herrn Wolfgang Pyszkalski konnte übergangslos eine Nachfolge für die Leitung der Abteilung Interne Rechenzentrumsdienste gefunden werden, gleichzeitig wurden dieser Abteilung die Aufgaben des Elektroniklabors sowie der Betreuung der Rechnernetze einschließlich des zugehörigen Personals übertragen. Ein Nachfolger für den Bereichsleiter Rechenzentrum konnte während des Berichtszeitraums leider noch nicht gefunden werden. Nunmehr ist vorgesehen, die Tätigkeit des Bereichsleiters Rechen-

zentrum mit einer Professur an der Humboldt-Universität zu Berlin (HUB) zu koppeln. Auf der Grundlage einer Kooperationsvereinbarung über die Zusammenarbeit zwischen der HUB und dem ZIB auf dem Gebiet des Scientific Computing ist an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II – Institut für Informatik – im Rahmen einer gemeinsamen Berufung eine C3-Professur für Praktische Informatik (S-Professur) unter besonderer Berücksichtigung des Schwerpunktes „Parallele und Verteilte Systeme“ verbunden mit der Leitung des Bereiches Rechenzentrum des ZIB zu besetzen. Wir hoffen, daß noch im 1. Halbjahr 1998 für diese Position ein ausgezeichneter Nachfolger gefunden werden kann.

Herr Gottschewski hat es dankenswerterweise übernommen, seine jahrzehntelangen Erfahrungen bei der Planung von Rechnerneubeschaffungen noch bis zur Neubesetzung der Position des Bereichsleiters dem ZIB zur Verfügung zu stellen und die Planungen für das Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN) (vgl. Abschnitt 4.5.2 auf Seite 132) für das ZIB durchzuführen. Auch an dieser Stelle sei sowohl Herrn Gottschewski als auch Herrn Kujawa für ihr jahrelanges großes Engagement für das ZIB gedankt.

Der Bereich Rechenzentrum besteht seit der Neugliederung zum 01. Juni 1997 aus drei Abteilungen:

- Höchstleistungsrechner
- Interne Rechenzentrumsdienste
- Anlagenbetrieb

Über die wesentlichen Tätigkeiten im Berichtszeitraum wird auf den folgenden Seiten berichtet.

4.2 Höchstleistungsrechner

Der *Berliner Landeshöchstleistungsrechner* ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Er besteht zur Zeit aus zwei Parallelrechnern und einem Vektorrechner im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Höchstleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbunds (NVV) (vgl. Abschnitt 4.5.1 auf Seite 131). Das gesamte verteilte System wird durch ein gemeinsames Zulassungsverfahren, ein gemeinsames Zugangssystem (NQE) und einheitliche Benutzer- und Projektkennungen zusammengehalten. Alle Komponenten des Landeshöchstleistungsrechners einschließlich des Parallelrechners sind seit ihrer jeweiligen Installation voll ausgelastet.

Erfreulicherweise gelang es, während der vergangenen vier Jahre die gesamte Konfiguration parallel zu den großen Ausbaumaßnahmen ständig zu erweitern und zu verbessern. Die mit den Rechnern des ZIB arbeitenden Forschergruppen konnten daher konti-

nuiertlich an der Verbesserung ihrer Codes arbeiten und ihre Forschung mittelfristig planen. Nachdem das ZIB über etwa zwei Jahre der Betreiber des leistungsstärksten Rechners in Deutschland war, belegt es nach Installation der neuen Höchstleistungsrechner bei der Max-Planck-Gesellschaft (RZ Garching), beim Forschungszentrum Jülich, bei der Universität Stuttgart und beim Deutschen Wetterdienst in den einschlägigen Übersichten über installierte Höchstleistungsrechner¹ immer noch einen eindrucksvollen sechsten Platz in Deutschland.

Einen Überblick über die im ZIB stehenden Rechnerkomponenten findet man in der Konfigurationsskizze in Abbildung 4.1 auf der nächsten Seite.

4.2.1 Installation des Rechners CRAY T3E

Zu den herausragenden Ereignissen im Rechenzentrum gehörte 1997 die Installation und Inbetriebnahme des zweiten massiv-parallelen Rechners CRAY T3E. Neben dem seit November 1994 betriebenen CRAY T3D SC mit 256 Prozessoreinheiten vom Typ DEC Alpha 21064-EV4 wurde im Februar 1997 der Rechner CRAY T3E LC mit zunächst 136 Prozessoreinheiten DEC Alpha 21164-EV5 (375 MHz), davon 128 Anwendungsprozessoren und 8 Systemprozessoren, installiert. Insgesamt werden zum Jahresende 1997 im ZIB Computer mit einer Gesamtleistung (Peak Performance) von mehr als 160 Gflop/s und zusammen mehr als 40 GByte Hauptspeicher betrieben.

Die Installation des Rechners erfolgte schnell und ohne bemerkenswerte Schwierigkeiten. Am 14. Februar liefen erste Anwendungen, der Beginn des Abnahmebetriebes wurde auf den 18. Februar 1997 festgelegt. Die Hardware des ausgelieferten Systems enthielt noch einen kritischen Fehler im *Read Ahead Buffer (Stream Buffer)*, der bei Nichtbeachtung von Vorsichtsmaßnahmen seitens der Benutzer zu Systemzusammenbrüchen führen konnte. Während der Abnahmephase haben wir diese Funktion außer Kraft gesetzt und nicht in die Prüfung einbezogen. Am 27. März 1997 konnte die Abnahme des Systems (bei Ausklammerung der Funktion *Stream Buffer*) erklärt werden. Im September 1997 konnte diese kritische Fehlfunktion schließlich durch Austausch der Prozessoren gegen solche vom Typ DEC Alpha 21164-EV5.6 (450 MHz) behoben werden. Gleichzeitig wurde die Anzahl der Prozessoren auf 152 (davon 136 Anwendungsprozessoren und 16 Systemprozessoren) erhöht. Die Gesamtleistung konnte durch die höhere Anzahl der Prozessoren und die höhere Taktfrequenz der Einzelprozessoren um etwa ein Viertel gesteigert werden.

Der Rechner CRAY T3E wurde von der Benutzerschaft sehr gut angenommen. Bereits vor Installation des Rechners waren einige Programme vom CRAY T3D zum T3E umgestellt worden (teils bei der Firma SGI/Cray in Eagan, Minnesota, teils am HLRZ in Jülich). Die Auslastung des Systems lag in den Monaten März bis Dezember über 70%; dies ist ein hoher Wert, da zu gewissen Tageszeiten eine Reihe von Prozessoren für Pro-

¹Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer, Erich Strohmaier, *TOP500 Supercomputer Sites*, 10th Edition, <http://parallel.rz.uni-mannheim.de/top500/top500.list.html>

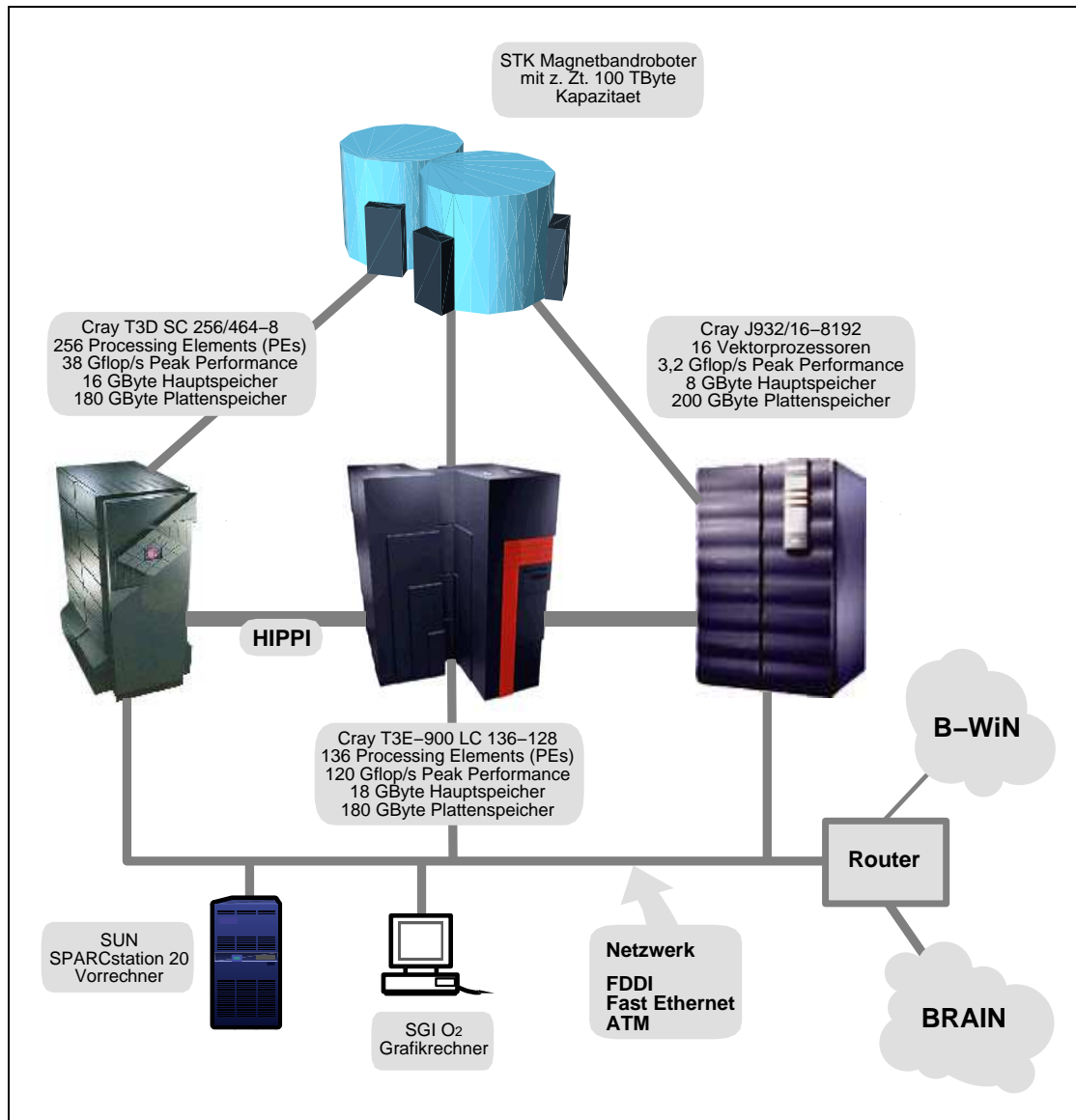


ABBILDUNG 4.1: Konfiguration der Höchstleistungsrechner im ZIB

grammentwicklung vorgehalten werden muß. Ausführlichere Informationen über Betriebserfahrungen, Rechnernutzung, erreichte Rechenleistung und Forschungsgebiete über die ersten sechs Monate des Betriebs können dem Technical Report TR 97-08 [1] entnommen werden.

Die Verfügbarkeit des CRAY T3E war in der Zeit von April bis Dezember 1997 noch nicht zufriedenstellend, insgesamt waren 74 außerplanmäßige Unterbrechungen des Rechenbetriebes zu verzeichnen (siehe Tabelle 4.1). Die Gesamtausfallzeit, bezogen auf die vom Rechnerhersteller zu verantwortenden Ursachen, betrug 252 Stunden, dies sind fast 3% der Kalenderzeit. Sowohl diese Gesamtzeit als auch die Anzahl der Ausfälle liegt erheblich über dem im ZIB von anderen Rechnern her gewohnten, zum Beispiel waren es beim Vektorrechner CRAY J932 11 Unterbrechungen (10 verursacht durch Hardware, 1 durch Software) und beim Parallelrechner CRAY T3D 3 Unterbrechungen (ausschließlich Software). Zu berücksichtigen ist, daß der Rechner CRAY T3E mit seinem verteilten Betriebssystem UNICOS/mk eine komplette Neuentwicklung ist und wir im Zeitraum April bis Dezember 19 verschiedene Versionen des Betriebssystems einsetzten.

Anzahl der Unterbrechungen	Ursache
15	Hardware: Fehler im Multi Purpose Node im Gigaring
8	Hardware: <i>Streams</i> -Option, weitgehend bei der Prüfung von Programmen auf Verträglichkeit mit dieser Option
3	sonstige Hardware-Fehler
11	Software: Einsatz neuer Möglichkeiten des Cray <i>Political Scheduler</i> , einer Neuentwicklung des Job-Schedulers
6	Software: fehlerhafte Arbeitsweise des Betriebssystems, speziell im Zusammenhang mit PVM
10	Administration: System- oder Konfigurationsparameter fehlerhaft gesetzt
16	Unzulänglichkeiten der Software, weitgehend im Zusammenhang mit dem Einsatz unterschiedlicher aktueller Software-Versionen
5	außerhalb der Verantwortung des Rechnerherstellers

TABELLE 4.1: Unterbrechungen und Ausfälle des Rechners CRAY T3E

Der Fehler in der Hardware des Multi Purpose Node wurde im Juli behoben, er ist seitdem nicht mehr aufgetreten. Nach Austausch der Prozessoren im September gab es keine Ausfälle mehr bei Benutzung der *Streams*-Option.

Der Cray *Political Scheduler* ist eine völlige Neuentwicklung für das Job Scheduling auf einem massiv-parallelen System. Das ZIB ist an einem frühzeitigen Einsatz dieser Software interessiert, teilweise haben sich Fehler erst bei Einsatz auf einem Produktionssystem wie unserem gezeigt. Diese Software ist mit Stand des 31. Dezember 1997

noch nicht ausgereift. Die 6 Unterbrechungen im Zusammenhang mit PVM traten ausschließlich im Mai vor einer entsprechenden Fehlerkorrektur auf. Die Unterbrechungen durch Administrationsfehler traten vornehmlich beim Einsatz neuer Softwarekomponenten auf, bei denen System- oder Konfigurationsparameter während Systemtestzeiten meist wegen fehlender Last nicht bemerkt werden konnten.

Wir erwarten für den Betrieb im Jahre 1998 eine erheblich geringere Zahl von Unterbrechungen.

Publikationen

- [1] W. Baumann, H. Busch, J. Gottschewski, Th. Steinke und H. Stüben, *Berliner Landeshöchstleistungsrechner – Parallelrechner Cray T3D/T3E: Betrieb, Nutzung, Projekte, Perspektiven für den Ausbau*, Technical Report TR 97-08, ZIB, 1997.

4.2.2 Systemkonfiguration

Die Systemkonfiguration im ZIB besteht aus Parallelrechner-, Vektorrechner-, Datenhaltungs- und Datenbearbeitungskapazität für die Vor- und Nachbearbeitung von Jobs. Im Jahr 1997 wurde neben der bereits erwähnten Erweiterung der Parallelrechnerkapazität die I/O-Bandbreite des Vektorrechners erhöht und die Anzahl der Bandgeräte für die „Redwood-Technik“ der Firma STK den gestiegenen Bedürfnissen angepaßt. Mit der Installation einer SGI O2 wurde den Projekten ein kleiner Rechner für grafische Nachbehandlung von Daten zur Verfügung gestellt. Einen Überblick über die Systemkonfiguration der Höchstleistungsrechner und der Vorrechner liefern die Tabellen 4.2 und 4.3 auf der nächsten Seite.

Im Juli 1997 hat das ZIB einen Backup-Server vom Typ SGI Origin 200 und hausweit das Produkt *netbackup* in Betrieb genommen, der die Workstations des ZIB vollständig und (nach einer Übergangsphase) teilweise auch die Höchstleistungsrechner mit Backup- und Archivierungs-Leistungen² versorgt.

Die ursprüngliche Backup-Lösung des ZIB konnte nur Filesysteme mit einer Größe bis zu 2 GB behandeln, und jedes Restaurieren erforderte einen Operateur-Eingriff.

Als Übergangslösung wurde der Dienst durch den Backup-Service der ZEDAT der Freien Universität Berlin (1995) erbracht. Damit war es möglich, auch größere Filesysteme (bis zu 5 GB) zu sichern. Bei dieser Lösung konnte der Benutzer (unter Beachtung der UNIX-Zugriffsrechte) Dateien ohne Unterstützung durch den Rechenbetrieb restaurieren lassen. Die technischen Bedingungen boten aber teilweise unakzeptable Bearbeitungszeiten beim Restaurieren von Dateien.

Mit der Übernahme des Dienstes durch die Abteilung Höchstleistungsrechner und der Bereitstellung einer dedizierten Hardware-Lösung können auch Filesysteme, die größer als 30 GB sind, problemlos gesichert werden, eine technisch bedingte Grenze

²<http://www.zib.de/rz/backup-service>

	Parallelrechner		Vektorrechner
Zentraleinheit	CRAY T3E-900 LC 136-128	CRAY T3D SC 256/464-8	CRAY J932/16-8192
Prozessoren	152 DEC Alpha EV5.6-21164	256 DEC Alpha EV4-21064	16 CRAY J90
Zykluszeit	2,22 ns	6,67 ns	10 ns
Hauptspeicher	144 Prozessoren mit je 128 MB 8 Prozessoren mit je 256 MB	64 MB je Prozessor	8 GB
Verbindungs- netzwerk	3-dimensionaler Torus	3-dimensionaler Torus	
Frontend- System		CRAY Y-MP 4E/464 4 CPUs Zykluszeit 6,0 ns 512 MB Hauptspeicher	
Ein-/Ausgabe- Subsystem	3 Giga-Ringe mit je 1 GB/s	3 I/O Cluster mit 8 MB Pufferspeicher	6 I/O Cluster mit 8 MB Pufferspeicher
Plattenspeicher	182 GB	188 GB	204 GB
Transferrate	10 MB/s	7,7 – 35,6 MB/s	7,2 – 12,4 MB/s
Anschlüsse für Bandlaufwerke	4 SCSI	2 Tape Channel Adapter	2 Tape Channel Adapter
Transferrate	20 MB/s	4,5 MB/s	20 MB/s
Netzanschlüsse	2 HIPPI mit je 100 MB/s ATM mit 19,4 MB/s FDDI mit 12,5 MB/s	HIPPI mit 100 MB/s ATM mit 19,4 MB/s FDDI mit 12,5 MB/s	HIPPI mit 100 MB/s ATM mit 19,4 MB/s FDDI mit 12,5 MB/s

TABELLE 4.2: Konfiguration der Höchstleistungsrechner

	Vorrechner <i>ufer</i>	Grafikrechner <i>aventurin</i>
Zentraleinheit	Sun SPARCstation 20 SX Model 502 MP	Silicon Graphics O2
Prozessoren	2 SuperSPARC	1 MIPS R5000
Zykluszeit	20 ns	5,5 ns
Hauptspeicher	160 MB	64 MB
Plattenspeicher	20 GB	3,5 GB
Netzanschlüsse	FDDI mit 12,5 MB/s	Fast Ethernet mit 12,5 MB/s
sonstige Peripherie	CD-ROM	CD-ROM, DAT, Scanner

TABELLE 4.3: Konfiguration der Vorrechner

für die Größe ist nicht bekannt. Die Zuverlässigkeit und Geschwindigkeit konnte erheblich gesteigert werden. Der Umfang der Backup-Leistungen hat sich seit der Inbetriebnahme des Backup-Servers des ZIB vervierfacht.

4.2.3 Software-Ausstattung

Das Software-Angebot auf den Höchstleistungsrechnern wurde im Berichtszeitraum aktualisiert und weiter ausgebaut. Mit der Installation des Parallelrechners CRAY T3E wurden neue Produkte vorwiegend auf dem neuen System bereitgestellt, während die Software auf dem älteren Parallelrechner CRAY T3D auf dem aktuellen Stand eingefroren wurde, zumal der Hersteller die Entwicklung neuer Produkte für das alte System eingestellt hat. Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Höchstleistungsrechner im ZIB liefern die Tabelle 4.4 auf der nächsten Seite und die Tabelle 4.5 auf Seite 120.

Auf den Parallelrechnern und dem Vektorrechner wurden die aktuellen Betriebssystemversionen UNICOS 9.0, UNICOS MAX 1.3 und UNICOS/mk 2.0 mit der zugehörigen aktuellen System-Software DMF 2.5 und NQE 3.2 installiert. Auf dem Vorrechner *ufer* wurde die Betriebssystemversion Solaris 2.5.1 installiert.

Auf allen Systemen wurde Fortran 90 als aktueller Sprachstandard bereitgestellt. Darüberhinaus wurde auf dem neuen Parallelrechner CRAY T3E ein Compiler für High Performance Fortran (HPF) installiert. Der alte Standard Fortran 77 ist bisher noch auf dem Parallelrechner CRAY T3D, dem Vektorrechner CRAY J90 und dem Vorrechner *ufer* verfügbar, die Compiler werden allerdings nicht mehr weiterentwickelt. Neben Fortran 90 stehen auf allen Rechnern auch Compiler für ANSI C und C++ in der jeweils aktuellen Version zur Verfügung.

Für die Anwendungsentwicklung wurden auf den beiden Parallelrechnern neben der proprietären und sehr effizienten Cray Shared Memory Access Library zunehmend auch MPI und PVM als portable Entwicklungsplattformen eingesetzt, um einen einfachen Übergang auf andere Rechnersysteme zu ermöglichen. Für die Parallelrechner und den Vektorrechner stehen vom Hersteller leistungsfähige Entwicklungswerkzeuge zur Verfügung, so daß auf die Beschaffung zusätzlicher Produkte zunächst verzichtet werden konnte.

Zu den numerischen Unterprogrammbibliotheken wurden die jeweils aktuellen Versionen installiert. Mit der Cray Scientific Library und den NAG Libraries (aus der NAG Landeslizenz) stehen leistungsfähige Unterprogrammbibliotheken zur Verfügung.

Für die grafische Nachbearbeitung von Ergebnissen wurde das Angebot an Grafik- und Visualisierungs-Software weiter ausgebaut. Für spezielle Visualisierungsanwendungen wurde ein Rechner SGI O2 bereitgestellt, der nach Absprache auch für externe Benutzer zur Projektbearbeitung eingesetzt werden kann.

Im Bereich Ingenieurwissenschaften wurden die jeweils aktuellen Versionen von ABAQUS und ADINA auf dem Vektorrechner CRAY J90 installiert.

	Parallelrechner CRAY T3E	Parallelrechner CRAY T3D	Vektorrechner CRAY J90	Vorrechner <i>ufer</i>
Betriebssystem	UNICOS/mk 2.0	UNICOS 9.0 UNICOS MAX 1.3	UNICOS 9.0	Solaris 2.5.1
System- Software	DMF 2.4 NQE 3.2	DMF 2.5 NQE 3.2	DMF 2.5 NQE 3.2	NQE 3.2
Compiler	ANSI C 6.0 C++ 3.0 CF90 3.0 HPF 2.3 CAM 2.3	ANSI C 5.0 C++ 2.0 CF77 6.0 CF90 2.0 CAM 2.2	ANSI C 6.0 C++ 3.0 CF77 6.0 CF90 3.0	ANSI C 4.2 C++ 4.2 GCC 2.7 F77 4.2 F90 4.2 NAG F90 2.2
Tools	CrayTools 3.0 MPT 1.1 MPICH 1.0	CrayTools 2.0 MPI 1.6 MPICH 1.0 PVM-3 FM 1.2 PARMACS 6.0 PARvis TOP ² VAMPIR	CrayTools 3.0 MPT 1.1 MPICH 1.0 AIT 2.1	MPICH 1.0 PVM 3.3
Numerik	CrayLibs 3.0 C++ Math C++ Tools NAG FL 17	CrayLibs 2.0 Aztec 1.0 NAG FL 16 CERNLIB ^a IMSL 3.0 ^a NAG CL 3 ^a	CrayLibs 3.0 Aztec 1.0 CERNLIB IMSL 3.0 NAG CL 3 NAG FL 16	Aztec 1.0 CERNLIB NAG CL 4 NAG FL 17 NAG F90 1.0 NAG TextWare
Visualisierung	CVT 3.1	CAT 1.0 AVS 5.0 ^a CVT 3.1 ^a EnSight 5.5 ^a IRIS Explorer 2.0 ^a NAG GL 4 ^a NCAR 3.2 ^a NewGKS ^a	CVT 3.1 EnSight 5.5 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS	AVS 5.0 AVS/Express 3.1 EnSight 5.5 Khoros 2.1 Mesa 2.4 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS SM 2.4 VTK 1.2
Ingenieur- wissenschaften			ABAQUS 5.6 ADINA 6.1	

TABELLE 4.4: Software-Ausstattung der Höchstleistungsrechner

^aauf Vorrechner CRAY Y-MP

Parallelrechner CRAY T3E	Parallelrechner CRAY T3D	Vektorrechner CRAY J90		
Ab-initio- Programme	Ab-initio- Programme	Ab-initio- Programme	Semiempirische Programme	Kraftfeld- Programme
DGauss 4.1 GAMESS (UK) 6.0	GAMESS (USA) SUPER- MOLECULE	ACES II 2.0 CADPAC 6.x ^a CRYSTAL 92 DGAUSS 4.0 ^a GAMESS (UK) 5.2 GAMESS (USA) Gaussian 94 MOLPRO 96	AMPAC 2.1 MNDO 94 ^a MOPAC 6.02	AMBER 3.0 GROMOS 96

TABELLE 4.5: Chemie-Pakete auf den Höchstleistungsrechnern

^ain UniChem 4.0

Im Chemie-Bereich wurden die jeweils aktuellen Versionen der Chemie-Pakete installiert. Hier überwiegt immer noch das Software-Angebot für den Vektorrechner CRAY J90, jedoch konnten mit DGauss und GAMESS (UK) auch die ersten Chemie-Pakete auf dem neuen Parallelrechner CRAY T3E bereitgestellt werden.

4.2.4 Zulassungsausschuß

Der Ausschuß für die Begutachtung von Rechenzeitanträgen für den Berliner Landeshöchstleistungsrechner³ (Zulassungsausschuß des ZIB) ist ein aus sieben Wissenschaftlern der Berliner und weiterer deutscher Universitäten bestehendes Gremium, das seine Aufgabe in der Unterstützung von förderungswürdigen Forschungsvorhaben mit einem erheblichen Bedarf an Höchstleistungsrechner-Ressourcen sieht. Er bewertet die wissenschaftliche Relevanz jedes Großprojektes und die Eignung der Aufgabenstellung für die Lösung mit Höchstleistungsrechnern. Auf der Grundlage dieser Bewertung, des begründeten Bedarfs an Ressourcen und der im NVV verfügbaren Kapazität teilt der Ausschuß Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Im Jahre 1997 wurden im ZIB etwa 60 Großprojekte aus den Gebieten Chemie, Geowissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Physik im Rahmen des NVV mit geeigneten Ressourcen versorgt. Der Anteil dieser Projekte an der an Benutzer abgegebenen Gesamtkapazität beträgt über 90%, ohne daß die direkt von den Universitäten oder vom ZIB zugelassenen kleineren Projekte dadurch beeinträchtigt werden. Diese kleineren Projekte dienen der Lehre, der Methodenforschung oder der Vorbereitung von Großprojekten.

³<http://www.zib.de/rz/zulassung/>

4.2.5 Großprojekte

Die Tabelle 4.6 liefert einen Überblick über die Verteilung der vom Zulassungsausschuß empfohlenen Großprojekte auf die Fachgebiete.

Herkunft	Chemie	Geowissenschaften	Ingenieurwissenschaften	Physik	Summe
FU Berlin	2	5		6	13
HU Berlin	6	1		4	11
TU Berlin	15		6	7	28
Dresden	2		1		3
Halle	1				1
Leipzig	3				3
Potsdam	3				3
Zeuthen				1	1
Summe	32	6	7	18	63

TABELLE 4.6: Verteilung der Großprojekte auf die Fachgebiete (Stand Dezember 1997)

Dazu kommt ein weiteres Projekt aus dem im Höchstleistungsrechnen *neuen* Fachgebiet Biologie aus der FU Berlin.

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugewiesenen Rechenzeitkontingenten. Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Parallelrechnern (in Klammern jeweils die Werte vom Vorjahr) nahmen die Fachgebiete Ingenieurwissenschaften mit 37% (46%) und Physik mit 37% (21%), gefolgt von den Fachgebieten Geowissenschaften mit 19% (13%) und Chemie mit 7% (20%) in Anspruch.

Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Vektorrechnern (einschließlich der Nutzung der Rechner in Kiel und Hannover – in Klammern jeweils die Werte vom Vorjahr) nahmen die Fachgebiete Chemie mit 50% (55%), gefolgt von den Fachgebieten Physik mit 36% (14%), Geowissenschaften mit 10% (23%) und Ingenieurwissenschaften mit 4% (8%) in Anspruch.

4.3 Fachberatung

Das im Jahresbericht 1996⁴ eingehend beschriebene Konzept der Fachberatung für die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte hat sich im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fach-

⁴<http://www.zib.de/bib/jb/JB96>

berater⁵ des ZIB zugeordnet (siehe Tabelle 4.7).

Anwendungsgebiet	Fachberater
allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Dipl.-Math. Hans-Hermann Frese Dr. Manfred Stolle Dipl.-Math. Wilhelm Vortisch
Chemie	Dr. Thomas Steinke
Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Visualisierung	Dipl.-Psych. Detlef Kehl

TABELLE 4.7: Fachberater im ZIB

Die wichtigsten Aufgaben der Fachberater sind:

- Hilfe bei der Auswahl des geeigneten Rechners für gegebene Programme unter Berücksichtigung der Höchstleistungsrechner im Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV) und der Bundeshöchstleistungsrechner in Jülich (HLRZ) und Stuttgart (HLRS).
- Diskussion der zugrundeliegenden Modelle und der eingesetzten Software
- Mitarbeit bei der Entwicklung neuer Programme und Diskussion der zugrundeliegenden Algorithmen
- Optimierung der Programme für die verwendeten Systeme
- Auswahl, Installation und Pflege sowie Dokumentation von Anwendungssoftware.

Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für den Erfolg der Projekte. Die Installation des massiv-parallelen Systems CRAY T3E im Februar 1997 erforderte durch Unterschiede gegenüber dem vorhandenen System CRAY T3D bzgl. Architektur und Betriebssystem zusätzlichen Einsatz der Fachberater bei Portierung und Optimierung von Programmen, diese Arbeiten werden durch Dipl.-Ing. Klaus Ketelsen (Silicon Graphics GmbH) aufgrund seiner Erfahrungen mit dem neuen System wesentlich unterstützt.

4.3.1 Chemie

Mit 32 Großprojekten im Bereich Chemie hat sich deren Anzahl im Berichtszeitraum leicht erhöht (26 Projekte im Vorjahr). Bedingt durch den Bedarf an Standardpro-

⁵http://www.zib.de/ZIBdoc/Rechner_im_ZIB/Fachberater.html

grammpaketen wird traditionell im Chemie-Bereich der überwiegende Teil der Großprojekte auf Vektorrechnern abgearbeitet. Hiervon ausgenommen sind *ab-initio* Moleküldynamik-Simulationen mit dem Car-Parinello-Programm CPMD⁶ auf den beiden Parallelrechnern des ZIB. Der leichte Rückgang des Anteils der Chemieprojekte ist im wesentlichen durch Strukturänderungen in den Arbeitsgruppen an den Berliner Universitäten bedingt.

Auf dem Vektorrechner CRAY J90 konnte die Verfügbarkeit wichtiger Chemie-Pakete durch Bereitstellung neuer Versionen der UniChem-Suite, MOLPRO96 und GAMESS (UK) gesichert werden. Mit der Installation von GROMOS96 wurde der Bereich der klassischen Moleküldynamik-Pakete aktualisiert.

Durch die intensive Zusammenarbeit mit *Oxford Molecular Inc.* (insbesondere mit Herrn Eric Stahlberg) konnte frühzeitig im 4. Quartal die CRAY-T3E-Version des Dichtefunktionalprogramms DGAUSS für Tests bereitgestellt werden. Die jetzige DGAUSS-Version 4.1 ist als Produktionscode allen Nutzern zugänglich. Durch eine enge Kooperation mit Dr. Martyn Guest (*Daresbury Lab* und *Computing for Science Ltd.*, UK) konnte die im SCF- und MP2-Teil parallelisierte Version von GAMESS (UK) auf dem T3E angeboten werden (siehe auch Tabelle 4.5 auf Seite 120).

Umgebungseinflüsse

Bearbeitet von: Thomas Steinke

Kooperationspartner: T. Clark, Computer-Chemie-Centrum, Universität Erlangen (CCC)

Förderung: DFG

Gegenstand des Projektes war die Implementierung von verbesserten Verfahren zur Beschreibung von Umgebungseinflüssen wie Dispersionswechselwirkungen oder elektrostatischen Wechselwirkungen mit umgebenden Struktureinheiten auf die molekulare Elektronenstruktur. Das Projekt ist mit der Fertigstellung einer Dissertationsschrift (M. Hutter, CCC) beendet worden.

RAMAN-Spektren

Bearbeitet von: Thomas Steinke

Kooperationspartner: M. Pfeiffer, Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie (MBI)

Zur Aufklärung des Mechanismus von intramolekularen Protonentransferreaktionen im angeregten Zustand wurden parallel zu den spektroskopischen Untersuchungen am MBI (Resonanz-Raman- und Femtosekunden-Spektroskopie) quantenchemische Berechnungen von Raman-Spektren des Grund- und angeregten Zustandes auf semiempirischem Niveau [1] durchgeführt. Speziell war aufgrund der theoretischen Resultate eine Zuordnung der niederfrequenten Schwingungsmoden, die mit der Protonenbewe-

⁶<http://www.mpi-stuttgart.mpg.de/docs/parrinello.html>

gung eng gekoppelt sind, möglich (siehe auch Projekt IIe.6 des MBI⁷). Nichtempirische Berechnungen des Diphenylhexatriens (Praktikum von B. Zietz am ZIB) waren Teil einer Machbarkeitsstudie zur Berechnung von optischen Eigenschaften konjugierter Kohlenwasserstoffe.

Publikationen

- [1] M. Pfeiffer, K. Lenz, A. Lau, T. Elsässer, T. Steinke, *Analysis of the Vibrational Spectra of Heterocyclic Aromatic Molecules Showing Internal Proton and Deuterium Transfer*, J. of Raman Spectroscopy 28 (1997), 61–72.

4.3.2 Ingenieurwissenschaften

Die Projekte aus den Ingenieurwissenschaften lassen sich in zwei Gruppen einteilen. Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) benutzen fast ausschließlich den Parallelrechner und arbeiten mit selbstgeschriebenen Forschungs-codes. Im Berichtszeitraum wurde der aerodynamische Entwurfscode FLOWer am ZIB auf den Rechner CRAY T3E portiert. Die Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich benutzen die kommerziellen Pakete ABAQUS und ADINA, sie werden auf dem Vektorrechner bearbeitet.

Der Fachberater arbeitet wissenschaftlich eng mit der Arbeitsgruppe von Prof. Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin (HFI)) auf dem Gebiet *Computational Fluid Dynamics* mit dem Schwerpunkt Modellierung und Berechnung der Austauschvorgänge in Mehrphasen-/Mehrkomponentenströmungen (Wärme, Stoff, Impuls, Turbulenz) zusammen.

Daneben gilt derzeit das besondere Interesse des Fachberaters der Unterstützung der Projekte durch Nutzbarmachung neuerer Methoden und Konzepte wie z.B. die interaktive Simulation, um damit die verfügbaren Ressourcen möglichst nah an den Arbeitsplatz der Anwender zu bringen und effektiv zu nutzen.

Zusammen mit dem HFI arbeitet der Fachberater an der Entwicklung von Hilfsmitteln zur interaktiven, netzverteilten Visualisierung und Simulation. Eine grafische Oberfläche mit integriertem Pre- und Post-processing ermöglicht es, von der Workstation des Anwenders aus jederzeit den momentanen Zustand der Simulation und die Ergebnisse zu beurteilen sowie die Simulation interaktiv zu steuern und im Ablauf zu beeinflussen.

Interaktive Simulationssteuerung

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann

Kooperationspartner: Deutsche Airbus (Bremen), Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR, Braunschweig), Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung

⁷<http://www.mbi-berlin.de/de/forschung/projekte/IIe/IIe6/iie6d.htm>

(GMD, St. Augustin), Hermann-Föttinger Institut (TU Berlin), Institut für Aerospace-Technologie (Hochschule Bremen), Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS)

Förderung: BMBF

Die im BRTB begonnenen Arbeiten zur interaktiven, netzverteilten Visualisierung und Simulation werden innerhalb des BMBF-geförderten Gemeinschaftsprojektes *EFEN-DA* fortgesetzt. Dort ist die gesamte Prozeßkette zum aerodynamischen Entwurf von Flugzeugen, bestehend aus Pre-processing, Simulation und Post-processing, in die einheitliche, multimediale kooperative Benutzeroberfläche *COVISE* integriert worden, die damit eine verteilte parallele Prozeßvisualisierung und -steuerung durch ein Entwicklerteam gestattet. Der Berliner Beitrag besteht in Entwurf und Implementierung des Prozeßsteuerungsmoduls (PSM) für die interaktive Steuerung der aerodynamischen Simulation mit den *FLOWer*-Code.

Online-Visualisierung auf CRAY T3E

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann

Kooperationspartner: Dr. Robert Haimes (Massachusetts Institute of Technology, USA), Kai Grunert (Hermann-Föttinger Institut, TU Berlin)

Förderung: DFG

Gemeinsam mit dem HFI wurde während eines Gastaufenthaltes des Autors Robert Haimes dessen Visualisierungs-Software *parallel Visual 3 (pV3)* auf das Betriebssystem UNICOS/mk portiert. Damit steht dieses Paket zur Online-Visualisierung großer instationärer Simulationsdatenmengen prinzipiell auch auf dem massiv-parallelen Rechner CRAY T3E zur Verfügung. Die Freigabe der Software für Benutzer ist jedoch bisher wegen ungelöster Systemprobleme noch nicht erfolgt.

4.3.3 Physik

Im Bereich der Physik hat sich die Zahl der Großprojekte im Vergleich zu 1997 von 12 auf 18 erhöht. Dementsprechend ist auch die von den Physikern verbrauchte Rechenzeit deutlich angewachsen. Im Gegensatz zum Vorjahr sind in diesem Jahr keine großen Portierungsarbeiten durchgeführt worden. Der Großteil der Physikprojekte kommt aus den Bereichen Astrophysik und Gitterfeldtheorie. Gegen Ende des Berichtsjahres sind verstärkt Anfragen von Festkörperphysikern aus Kiel und von der Technischen Universität Berlin gekommen, die im kommenden Jahr in Projekte umgesetzt werden sollen.

Gitterfeldtheorie

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Prof. Volkard Linke (Freie Universität Berlin), Prof. Gerit Schierholz (DESY-IfH Zeuthen), Prof. Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin)

Das wissenschaftliche Arbeitsgebiet des Fachberaters Physik ist die Gitterfeldtheorie.

In diesem Gebiet werden Untersuchungen zur Theorie der Elementarteilchen mithilfe von Computersimulationen durchgeführt. Derartige Untersuchungen gehören zu den Grand Challenges des Supercomputings. Der Fachberater gehört derzeit zwei Arbeitsgruppen an, der Gruppe von Prof. Volkard Linke (Freie Universität Berlin) und Prof. Gerrit Schierholz (DESY-IfH Zeuthen) sowie der Gruppe von Prof. Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin).

Die Arbeitsgruppen untersuchen die Quantenelektrodynamik (QED) in verschiedenen Formulierungen sowie die Quantenchromodynamik (QCD). Während Untersuchungen der QCD zum Ziel haben, berechnete Teilcheneigenschaften mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen, stehen beim Studium der QED allgemeine Fragen zur Struktur von Gitterfeldtheorien im Vordergrund.

Im Bereich der QCD hat der Fachberater die Programmoptimierung entscheidend vorangetrieben. Im Bereich der QED ist er wesentlich an der Durchführung der numerischen Untersuchungen beteiligt. Die in der letzten Zeit durchgeführten Untersuchungen haben zu sehr interessanten Ergebnissen geführt. Sie legen nahe, daß es in der QED kein Landau-Pol-Problem gibt, und zeigen eine Lösung dieses seit der Mitte der 50er Jahren offenen Problems.

Die Lösung des Landau-Pol-Problems beruht darauf, daß der Gitterabstand a aufgrund der chiralen Symmetriebrechung nicht beliebig klein gewählt werden kann. Im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen zeigt sich, daß a immer so groß ist, daß der entsprechende maximale Impuls kleiner ist als der Wert, der den Landau-Pol festlegt. Aufgrund dessen gibt es kein Landau-Pol-Problem in der QED.

Publikationen

- [1] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Seeking the Equation of State of Non-Compact Lattice QED*, Nucl. Phys. B487 (1997), 313–341.
- [2] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, H. Perlt, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson und H. Stüben, *Improved Quenched QCD on Large Lattices – First Results*, Preprint DESY 97–175 und FU-HEP/97–05, Freie Universität Berlin, September 1997.
- [3] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Resolution of the Landau pole problem in QED*, Preprint DESY 97–258, FU-HEP/97–07, Freie Universität Berlin und HUB-EP-97/56, Humboldt-Universität zu Berlin, September 1997.
- [4] A. Hoferichter, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preußker und H. Stüben, *Effects of dynamical Wilson fermions and the phase structure of compact QED₄*, Preprint HUB-EP-97/70, Humboldt-Universität zu Berlin, Oktober 1997.

- [5] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Is there a Landau Pole Problem in QED?*, Preprint DESY 97–252 und HUB-EP-97/88, Humboldt-Universität zu Berlin, Dezember 1997.

4.4 Projekte des Rechenzentrums

4.4.1 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

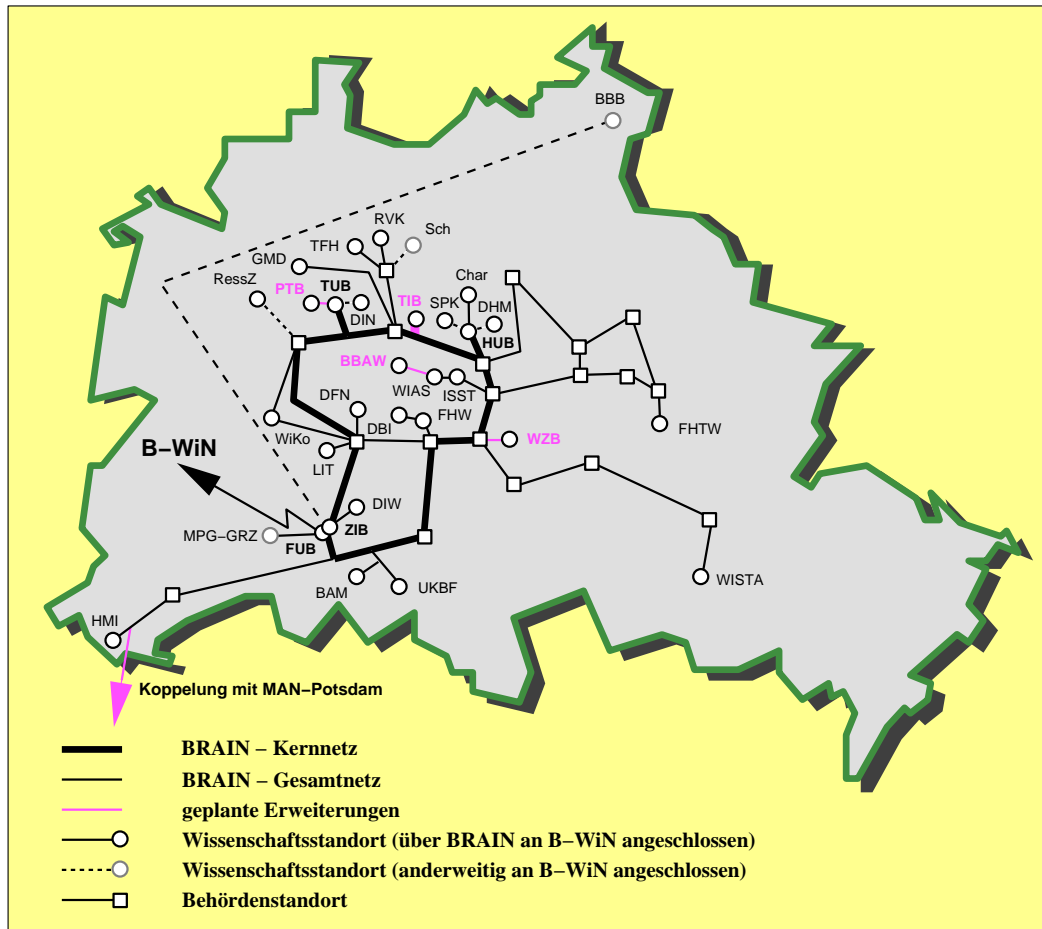
Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Nachdem im Jahr 1996 das Breitband-Wissenschaftsnetz (B-WiN) durch den DFN-Verein einschließlich der Anbindung der Berliner Hochschulen, des ZIB und einiger weiterer Wissenschaftseinrichtungen mit einem Gemeinschaftsanschluß über 34 Mb/s in Betrieb gegangen ist, die nötigen Verträge mit dem DFN-Verein und den das *BRAIN* (Berlin Research Area Information Network) tragenden Einrichtungen abgeschlossen wurden, sowie das DFN-Projekt *Regionales Testbed Berlin* erfolgreich abgeschlossen wurde, lagen im Jahr 1997 folgende Schwerpunkte vor:

- Inbetriebnahme des B-WiN-Hauptanschlusses mit 155 Mb/s unter Verantwortung des DFN-Vereins auch für das Management des Berliner Netzbetriebes
- Erweiterungen des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT
- Verknüpfung des Berliner Wissenschaftsnetzes mit dem Potsdamer Wissenschaftsnetz

Kapazitätserhöhung des B-WiN-Hauptanschlusses auf 155 Mb/s

Ein entscheidender Schritt war im Berichtszeitraum die Kapazitätserhöhung des B-WiN-Hauptanschlusses auf 155 Mb/s und damit verbunden die Übergabe der Verantwortung für das Management des Berliner Netzbetriebes an den DFN-Verein. Die Verträge der Wissenschaftseinrichtungen mit dem DFN-Verein basieren auf dem Modell des Gemeinschaftsanschlusses. Folgende zehn Einrichtungen beteiligen sich seit 1996 neben dem ZIB an dem Gemeinschaftsanschluß mit Teilbandbreiten von 1 Mb/s bis 34 Mb/s: Freie Universität Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Technische Universität Berlin, Hahn-Meitner-Institut Berlin, Fraunhofer-Gesellschaft (mit ihren Einrichtungen in Berlin am Standort Institut für Software- und Systemtechnik), Fachhochschule für Technik und Wirtschaft, Technische Fachhochschule, die Fa. Schering sowie der DFN-Verein selbst mit seiner Geschäftsstelle in Berlin. Im Laufe des Jahres 1997 sind elf weitere Wissenschaftseinrichtungen hinzugekommen: der Wissenschaftsstandort Adlershof mit den Einrichtungen Forschungszentrum Informationstechnik (GMD-FIRST), Max-Born-Institut und Bessy GmbH, weiterhin die Max-Planck-Gesellschaft (mit ihren Einrichtungen in Berlin und Potsdam) am Standort MPG-GRZ, der Biomedizinische Forschungscampus Berlin-Buch (einschließlich Max-Delbrück-Centrum),



BAM	Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
BBAW	Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften
BBB	Biomedizinischer Forschungscampus Berlin-Buch
Char	Universitätsklinikum Charité (HUB)
DBI	Deutsches Bibliotheksinstitut
DFN	Deutsches Forschungsnetz, Geschäftsstelle
DHM	Deutsches Historisches Museum
DIN	Deutsches Institut für Normung
DIW	Deutsches Institut für Wirtschaftsforschung
FHTW	Fachhochschule für Technik und Wirtschaft
FHW	Fachhochschule für Wirtschaft
FUB	Freie Universität Berlin
GMD	GMD Forschungszentrum Informationstechnik GmbH
HMI	Hahn-Meitner-Institut Berlin
HUB	Humboldt-Universität zu Berlin
ISST	Institut für Software und Systemtechnik (FhG)
LIT	Landesamt für Informationstechnik
MPG-GRZ	Max-Planck-Gesellschaft, Gemeinsames RZ
PTB	Physikalisch-Technische Bundesanstalt
RessZ	Ressourcenzentrum (MPG)
RVK	Universitätsklinikum Rudolf Virchow (HUB)
Sch	Schering AG
SPK	Stiftung Preußischer Kulturbesitz
TFH	Technische Fachhochschule
TIB	Technologie- und Infomarkt Berlin
TUB	Technische Universität Berlin
UKBF	Universitätsklinikum Benjamin Franklin (FUB)
WIAS	Weierstraß-Institut
WiKo	Wissenschaftskolleg zu Berlin
WISTA	Wissenschaftsstandort Adlershof
WZB	Wissenschaftszentrum Berlin
ZIB	Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

ABBILDUNG 4.2: Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

das Landesamt für Informationstechnik, die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, das Deutsche Historische Museum, die Stiftung Preußischer Kulturbesitz (Staatsbibliothek), das Deutsche Bibliotheksinstitut, GMD-FOKUS, das Weierstraß-Institut und die DeTeBerkom GmbH. Weitere Einrichtungen nehmen Teilkapazitäten bis zu 128 Kb/s nach dem Modell des Sammelanschlusses ab. Jede beteiligte Einrichtung finanziert ihren Anteil an der Bandbreite gemäß den Kostentabellen des DFN-Vereins. In einer Ergänzung zum Standardvertrag werden die Verantwortlichkeiten für Zuleitungen (von der jeweiligen Einrichtung zum Hauptanschluß in der Freien Universität Berlin) unter Hinweis auf die Infrastruktur des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN sowie der Netzbetrieb innerhalb Berlins einschließlich einer Umlage der Kosten für Geräte und Management geregelt. Für Planung und Betreuung dieser Zugänge wird auf die BRAIN-Planungsgruppe verwiesen; die zugehörige Geschäftsstelle ist im ZIB eingerichtet worden.

Seit April 1997 wird der Gemeinschaftsanschluß mit einer Bandbreite von 155 Mb/s betrieben, gleichzeitig konnten die Bandbreitenanteile der teilnehmenden Einrichtungen weitgehend kostenneutral erhöht werden. Mit Beginn des April ging auch die vom DFN-Verein bzw. der Deutschen Telekom (im Auftrag des DFN-Vereins) in den einzelnen Einrichtungen installierte neue Netzgerätetechnik (ATM-Switch und IP-Router) in Verantwortung des DFN-Vereins in Betrieb. Im Rahmen der Vereinbarungen mit dem DFN-Verein wird auch der lokale Berliner Netzverkehr über diese Geräte durchgeführt, jedoch geht die hier anfallende Bandbreite nicht zu Lasten der aus Berlin hinausgehenden (kostenpflichtigen) Netzverbindungen.

Die Kapazität des Berliner Gemeinschaftsanschlusses mit 155 Mb/s war bereits durch die genannten Einrichtungen vollständig verteilt; es wurde eine Warteliste für weitere Interessenten aufgestellt. Gemeinsam mit dem DFN-Verein und den Einrichtungen im MAN Potsdam suchen wir nach Möglichkeiten zur Kapazitätsverstärkung, siehe dazu weiter unten mehr.

Erweiterungen des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT

Die technische Grundlage von BRAIN ist das Lichtwellenleiter-Netz des Landes Berlin, welches vom LIT für die Behördenstandorte sowie – in Zusammenarbeit mit den Wissenschaftseinrichtungen – für die Wissenschaftseinrichtungen in weitgehend vorhandenen Kabelschächten im öffentlichen Straßenland verlegt ist. Im Jahr 1997 wurde das Netz insbesondere in Dahlem (BAM, FUB, HUB, MPG und ZIB), Schöneberg (DBI, FHW) und Tiergarten (GMD FOKUS) erweitert. Im September 1997 ging auch die wichtige Teilstrecke vom ZIB zum Bezirksamt Wilmersdorf in Betrieb; damit sind ZIB und die Universitäten (fast) vollständig redundant angebunden. Vornehmlich durch neue Abstimmungen zwischen dem LIT und dem Besitzer der Kabelkanalanlagen, der Berliner Feuerwehr, sowie durch einen Auftragsstau beim LIT ergaben sich auch 1997 erhebliche Verzögerungen bei der Realisierung neuer Anschlüsse. Erst nach Intervention auf der Ebene der Staatssekretäre zwischen der Senatsverwaltung für Wissenschaft,

Forschung und Kultur und der für Inneres wurde die Planung für zwölf der auf einen Anschluß wartenden Wissenschaftseinrichtungen beschleunigt. Verunsicherungen hinsichtlich einer zukünftigen Zusammenarbeit mit dem LIT ergeben sich auch durch den Beschluß des Senats von Berlin vom 05. August 1997, das LIT zum 01. Januar 1998 in einen *Landesbetrieb für Informationstechnik* nach §26 Landeshaushaltsordnung zu überführen und freie Kapazitäten an Glasfaser- und Kabelkanalanlagen, z. B. über die Fa. Berlikomm, ein Tochterunternehmen der Berliner Wasserbetriebe, auf dem freien Markt zu veräußern.

Verknüpfung des Berliner Wissenschaftsnetzes mit dem Potsdamer Wissenschaftsnetz

Am 16. Oktober 1997 ging das Potsdamer Wissenschaftsnetz offiziell in Betrieb. Es verbindet die wichtigen in Potsdam gelegenen Wissenschaftseinrichtungen untereinander auf LWL-Strecken, die von der Energieversorgung Potsdam (EVP) bereitgestellt werden. Gemeinsam wird der 34 Mb/s-B-WiN-Anschluß in der Universität Potsdam genutzt. Auf Grund einer von der BRAIN-Planungsgruppe, der Universität Potsdam sowie den beiden Wissenschaftsverwaltungen erarbeiteten Beschlußvorlage stimmte der Koordinierungsrat der Länder Berlin und Brandenburg am 24. September 1997 der Kopplung der Hochgeschwindigkeitsnetze für die Wissenschaft zwischen beiden Ländern zu. Mit der direkten Verbindung voraussichtlich ab dem 2. Quartal 1998 werden höhere Netzbandbreiten zwischen Berliner und Potsdamer Einrichtungen kostengünstig verfügbar und es können nach einer Aufrüstung des Potsdamer B-WiN-Anschlusses auf 155 Mb/s die auf der Warteliste stehenden Berliner Einrichtungen zu den gleichen Bedingungen wie an den bereits existierenden Berliner Gemeinschaftsanschluß angebunden werden. Für die Potsdamer Einrichtungen ergibt sich eine kostenneutrale Erhöhung der Anschlußbandbreite.

4.4.2 Kooperation mit der BAM

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann, Jens With

Das Ziel der Kooperation zwischen der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) und dem ZIB ist der effektive Einsatz von Höchstleistungsrechnern.

Die Schwerpunkte der Arbeit sind:

- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen im ZIB für die Rechenaufträge der BAM.
- Laufende Anpassung der technischen Datenkommunikation an den sachlich gebotenen technischen Stand.
- Optimierung von Software für den Landeshöchstleistungsrechner.
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer in der BAM.

Die Arbeitsbedingungen für netzverteilte Anwendungen konnten im Berichtsjahr durch einen Ausbau des Netzanschlusses der BAM an das Berliner BRAIN deutlich verbessert werden.

Die Kooperation mit der BAM umfaßt außerdem auch die Entwicklung und Erschließung moderner Rechenmethoden für ingenieurwissenschaftliche Anwendungen im Bereich der Materialforschung und -prüfung. Dieses Gebiet der Kooperation wird vom Forschungsbereich des ZIB betreut.

4.4.3 UNICORE

Bearbeitet von: Hubert Busch, Hinnerk Stüben

Förderung: Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF)

Das Ziel des Projektes UNICORE⁸ (Uniformes Interface für Computer-Ressourcen) ist, sichere WWW-basierte Techniken zu entwickeln, die den Zugriff auf Supercomputer-Ressourcen nahtlos und weitgehend standardisiert realisieren. Dem Anwender soll die Nutzung derartiger Systeme ohne detaillierte Kenntnis von Netzwerk-Bedingungen oder organisatorischen Regularien des Zielsystems ermöglicht werden. In diesem Projekt werden Basistechniken entwickelt, wie sie die vom BMBF eingesetzte Projektgruppe VESUZ (Verbund der Supercomputer-Zentren) als notwendig erachtet hat (vgl. Abschnitt 4.5.3 auf Seite 133).

An dem Projekt sind neben dem ZIB folgende Einrichtungen und Firmen mit unterschiedlichen Beiträgen beteiligt: Forschungszentrum Jülich, Leibniz-Rechenzentrum München, Rechenzentrum Universität Stuttgart, Deutscher Wetterdienst, Paderborn Center for Parallel Computing, Rechenzentrum der Universität Karlsruhe, GENIAS GmbH, PALLAS GmbH, Fujitsu, IBM, NEC, SGI/Cray, debis Systemhaus und INPRO GmbH.

Das ZIB beteiligt sich an Entwurf und Test des UNICORE-Systems. Der Schwerpunkt des Beitrages des ZIB liegt auf der Entwicklung einer nahtlosen Programmierumgebung, wobei das ZIB seine jahrelangen Erfahrungen im heterogenen Supercomputing aus dem Norddeutschen Vektorrechnerverbund einbringt.

4.5 Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren

4.5.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV)

Seit 1984 praktizieren die Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein eine Verwaltungsvereinbarung, die die gemeinsame Nutzung und abgestimmte Neubeschaffung ihrer jeweiligen Landeshöchstleistungsrechner sicherstellt. Der dadurch be-

⁸<http://www.kfa-juelich.de/zam/RD/coop/unicore>

gründete Norddeutsche Vektorrechnerverbund (NVV) hat in den vergangenen 13 Jahren bewirkt, daß zu jeder Zeit an mindestens einem der drei Standorte Berlin, Hannover und Kiel ein moderner Höchstleistungsrechner installiert war. Diese günstige Versorgungsstruktur in den drei Ländern ermöglichte die Bearbeitung immer komplexerer Probleme und ermutigte die Forschungsgruppen in der Region, Probleme in Angriff zu nehmen, für deren Bearbeitung die existierenden Landeshöchstleistungsrechner nicht mehr ausreichen. Im Rahmen des NVV stehen den Berliner Projekten neben den Berliner Höchstleistungsrechnern die in Tabelle 4.8 angegebenen Kapazitäten zur Verfügung.

Ort	Rechner	Prozessorzahl	Peak Performance je Prozessor	Berliner Anteil
RRZN Hannover	Fujitsu/SNI VPP 300	4	2253 Mflop/s	11.250 ZVL
Universität Kiel	CRAY T94	4	1800 Mflop/s	23.000 ZVL
	CRAY J90	20	200 Mflop/s	20.000 ZVL
ZIB Berlin	CRAY J90	16	200 Mflop/s	70.000 ZVL
	CRAY T3D	256	150 Mflop/s	22.000 ZPL
	CRAY T3E	136	900 Mflop/s	47.000 ZPL

TABELLE 4.8: Berliner Anteil an den Höchstleistungsrechnern im NVV (1 ZVL = 1 CPU-h J90, 1 ZPL = 64 PE-h T3D bzw. 16 PE-h T3E)

4.5.2 Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)

Auf der Basis der jahrelangen Erfahrungen im Norddeutschen Vektorrechnerverbund und der Empfehlungen des Wissenschaftsrates aus dem Jahre 1995 zum Wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen (High Performance Scientific Computing – HPSC) haben die fünf Küstenländer Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein zusammen mit Berlin die gemeinsame Beschaffung eines zur Bearbeitung von *Grand Challenges* geeigneten Computersystems als Investitionsvorhaben für die Jahre 1999–2002 beim Wissenschaftsrat angemeldet (Zentrum für Höchstleistungsrechnen in Norddeutschland, HLRN). Inzwischen steht der Abschluß einer Verwaltungsvereinbarung dieser sechs Länder unmittelbar bevor. In dieser Verwaltungsvereinbarung werden Fragen über Finanzierung, Betrieb, Nutzung, Forschungsförderung und der Nutzung des in der erweiterten Region vorhandenen Wissens (Kompetenznetzwerk) geregelt.

Im Laufe des Jahres 1997 erhielt das ZIB von den drei Berliner Universitäten zum beabsichtigten weiteren Ausbau des ZIB zu einem HPSC-Zentrum mit einem deutschlandweiten Nutzungsangebot durchweg positive Stellungnahmen hinsichtlich der seitens der Universitäten geschilderten Projekte, die von einem Höchstleistungszentrum

in der Region besonders profitieren würden. Die positive Haltung der Berliner Hochschulen, der große regionale Bedarf und das Gesamtkonzept des ZIB waren ausschlaggebend für die Bewerbung des ZIB als Standort für eine der beiden Hauptkomponenten des geplanten HLRN, nämlich für den massiv-parallelen Rechner.

4.5.3 Zusammenarbeit mit weiteren HPSC-Zentren

Ziel der Zusammenarbeit ist die Förderung des HPSC (High Performance Scientific Computing) in der Region Berlin/Brandenburg. Die Kooperationen berühren im wesentlichen folgende Teilgebiete:

- Nutzung von Höchstleistungsrechnern einschließlich schneller Datennetze
- Paralleles Rechnen, verteilte Anwendungen
- Aus- und Weiterbildung auf allen Gebieten des HPSC

Um diesem Ziel gerecht zu werden, bestehen vertragliche Vereinbarungen des ZIB mit der Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) für das DESY Institut für Hochenergieforschung Zeuthen, mit dem Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut) Potsdam und (in Vorbereitung) mit der Universität Potsdam.

Im einzelnen räumen sich die Kooperationspartner gegenseitig Anteile an der Kapazität ihrer Rechner ein. Die Anteile des ZIB an diesen Systemen können nach Prüfung im Einzelfall auch von Projekten der Berliner Universitäten genutzt werden. Im Rahmen dieser Zusammenarbeit steht damit Berliner Projekten Kapazität an Höchstleistungsrechnern der Alenia Spazio, S.p.A APE-100 und Silicon Graphics Cray Origin 2000 zur Verfügung.

Am Regionalen HPC-Forum nimmt auch das Institut für Klimafolgenforschung Potsdam (PIK) teil, obwohl dort zur Zeit keine direkten HPSC-Aktivitäten stattfinden. Das Institut verfügt aber über einen Rechner derselben Leistungsklasse wie beim ZIB oder DESY, der in erster Linie für die Unterhaltung großer Datenbasen genutzt wird. Das hierbei aufgebaute spezielle Wissen wird ohne Zweifel demnächst auch in den *traditionellen* HPSC-Zentren benötigt werden. Umgekehrt wird das PIK in Zukunft noch mehr als bisher das bei DESY und im ZIB aufgebaute HPSC-Wissen nutzen.

Die zahlreichen Kooperationen, die den Forschungsbereich des ZIB mit anderen HPSC-Aktivitäten verbinden, werden an dieser Stelle nicht dargestellt, obwohl sie die ideelle Basis der hervorragenden Stellung des ZIB auf dem Gebiet des HPSC sind. Über diese Aktivitäten wird im Zusammenhang mit den Forschungsarbeiten des ZIB berichtet.

Gemeinsam mit den Leitern des Rechenzentrums der Universität Stuttgart (RUS) und des Leibniz-Rechenzentrums München (LRZ) sowie mit und unter Federführung des Leiters des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich GmbH erstellte der Präsident des ZIB in den Jahren 1996 und 1997 im Auftrag

des BMBF eine Studie *Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland (VESUZ) – eine Machbarkeitsanalyse* [1]. Im folgenden wird aus dieser Studie zitiert:

Die Machbarkeitsanalyse definiert – unter dem Gesichtspunkt der Bereitstellung höchster Rechenleistung für Hochschulen, für Forschungseinrichtungen und soweit möglich für Wirtschaftsunternehmen – die Rand- und Rahmenbedingungen für die Einbettung der Supercomputer-Zentren in der deutschen Wissenschaft und Forschung in einen übergreifenden Kommunikations- und Koordinationsverbund. [...] Es werden Folgerungen für die Machbarkeit gezogen, die sich bietenden Optionen identifiziert und Empfehlungen, Vorschläge und Maßnahmen für weiteres Handeln abgeleitet. [...] Die Umsetzung der Vorschläge und Empfehlungen soll den weiterreichenden Aufbau einer zukunftsorientierten, national koordinierten und strategisch richtungweisenden (Infra-) Struktur für das Wissenschaftliche Rechnen in Deutschland beschleunigen und mit der so erreichbaren intensiven Kooperation zwischen Universitäten, Forschungseinrichtungen und Industrieunternehmen und über die hierdurch induzierten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf diesem Gebiet nachhaltig dazu beitragen, den Wissensaustausch und Technologietransfer weiter zu fördern und damit den Technologie-, Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort Deutschland dauerhaft zu stärken.

Das Rechenzentrum des ZIB pflegt auf verschiedenen Ebenen gute Kontakte zu den Bundeshöchstleistungsrechenzentren in Jülich und Stuttgart. Die Vorsitzenden der jeweiligen Ausschüsse zur Vergabe von Rechenzeiten treffen sich regelmäßig. Speziell im Bereich Chemie besteht ein reger Gedankenaustausch zwischen den Fachberatern im Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM) des Forschungszentrums Jülich und im ZIB. Darüber hinaus arbeiten Mitarbeiter der Höchstleistungsrechenzentren HLRS (Stuttgart), ZAM und ZIB gemeinsam im Projekt UNICORE (vgl. Abschnitt 4.4.3 auf Seite 131) an einer Vereinfachung und Vereinheitlichung des Zugangs zu Höchstleistungsrechnerressourcen.

Das ZIB informierte die Projektleiter der Berliner Großprojekte über die Bereitstellung der Rechenmöglichkeiten bei den Bundeshöchstleistungsrechenzentren in Stuttgart (Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart – HLRS) und Jülich (Höchstleistungsrechenzentrum Jülich – HLRZ). Die Fachberater des ZIB unterstützen auch die Berliner Benutzer beim Einsatz dieser Rechner für die Bearbeitung ihrer Projekte.

Bereits im Jahre 1997 wurde der Rechner Cray T3E (mit 512 Prozessoren) des HLRS (Stuttgart) von drei Berliner Projekten mit ca. 11% der Gesamtnutzung überdurchschnittlich in Anspruch genommen. Dagegen liegt die Nutzung der Cray T3E des HLRZ Jülich (ebenfalls 512 Prozessoren) und der NEC SX-4/32 des HLRS durch Berliner Projekte bei ca. 3% beziehungsweise unter 2% der Gesamtnutzung.

Publikationen

- [1] F. Hoßfeld, P. Deuffhard, H.-G. Hegering, R. Rühle, B. Monien und K. Ullmann, *Verbund der Supercomputer-Zentren in Deutschland – eine Machbarkeitsanalyse*, Technical Report 01 IR 602/9, Forschungszentrum Jülich, ZAM, 1997.

4.6 Interne Rechenzentrumsdienste

Aufgabe der Abteilung Interne Rechenzentrumsdienste ist die Unterstützung der Forschungsarbeit des ZIB durch Planung, Beschaffung und Erhaltung der Ausstattung mit Software und Geräten der Kommunikations- und Informationstechnik. Im Berichtszeitraum wurde die Abteilung Interne Rechenzentrumsdienste umstrukturiert und erweitert. Sie besteht jetzt aus den drei Gruppen Workstations, Kommunikationsdienste und Netze, Labor. Die Zusammenfassung dieser Aufgabengebiete trägt der Entwicklung bei der Pflege der informationstechnischen Infrastruktur Rechnung, daß immer mehr Aufgaben nur noch in der interdisziplinären Zusammenarbeit von Mitarbeitern dieser drei Gruppen gelöst werden können. Der Bestand an Workstations konnte modernisiert und erweitert werden. Dabei handelte es sich um wenige, dafür qualitativ hochwertige Maschinen an speziellen Arbeitsplätzen, um wenige sehr leistungsfähige Server für besondere Aufgaben sowie um eine Reihe von Workstations mit höherer Grafikleistung. Korrekturen zur Behebung von Fehlern in der Herstellersoftware werden jetzt kontinuierlich auf ihre Brauchbarkeit getestet und in die Systeme eingebaut. So arbeitsintensiv dieses Verfahren ist, wird damit doch die Qualität bei der Benutzung der Workstations deutlich verbessert. Weitere Schwerpunkte der Arbeiten bildeten die Mitarbeit bei der inhaltlichen und formalen Umstrukturierung vom WEB-Service des ZIB. Im Bereich der Rechnernetze wurde das bestehende Konzept durch Erneuerung, Verbesserung der Ausstattung und Umverteilung einiger Komponenten abgerundet (siehe Abbildung 4.3 auf der nächsten Seite). Gleichzeitig mit der Anbindung der ersten Rechner über ATM, haben wir den Einsatz von FDDI erheblich reduziert. FDDI spielt nunmehr nur noch für die CRAY's und deren Vorrechner eine Rolle. Die mit dem Bezug des Neubaus in Betrieb genommene Technik der strukturierten Verkabelung und die digitale Telefonanlage haben sich technisch und unter dem Gesichtspunkt einer Kosten-Nutzenanalyse bewährt sowie ihre hohe Flexibilität unter Beweis gestellt. Die Entscheidung, Arbeiten an der Konfiguration von Rechnern der TK-Anlage selbst zu übernehmen, hat sich in Bezug auf die Flexibilität als einzig praktikable Lösung bestätigt.

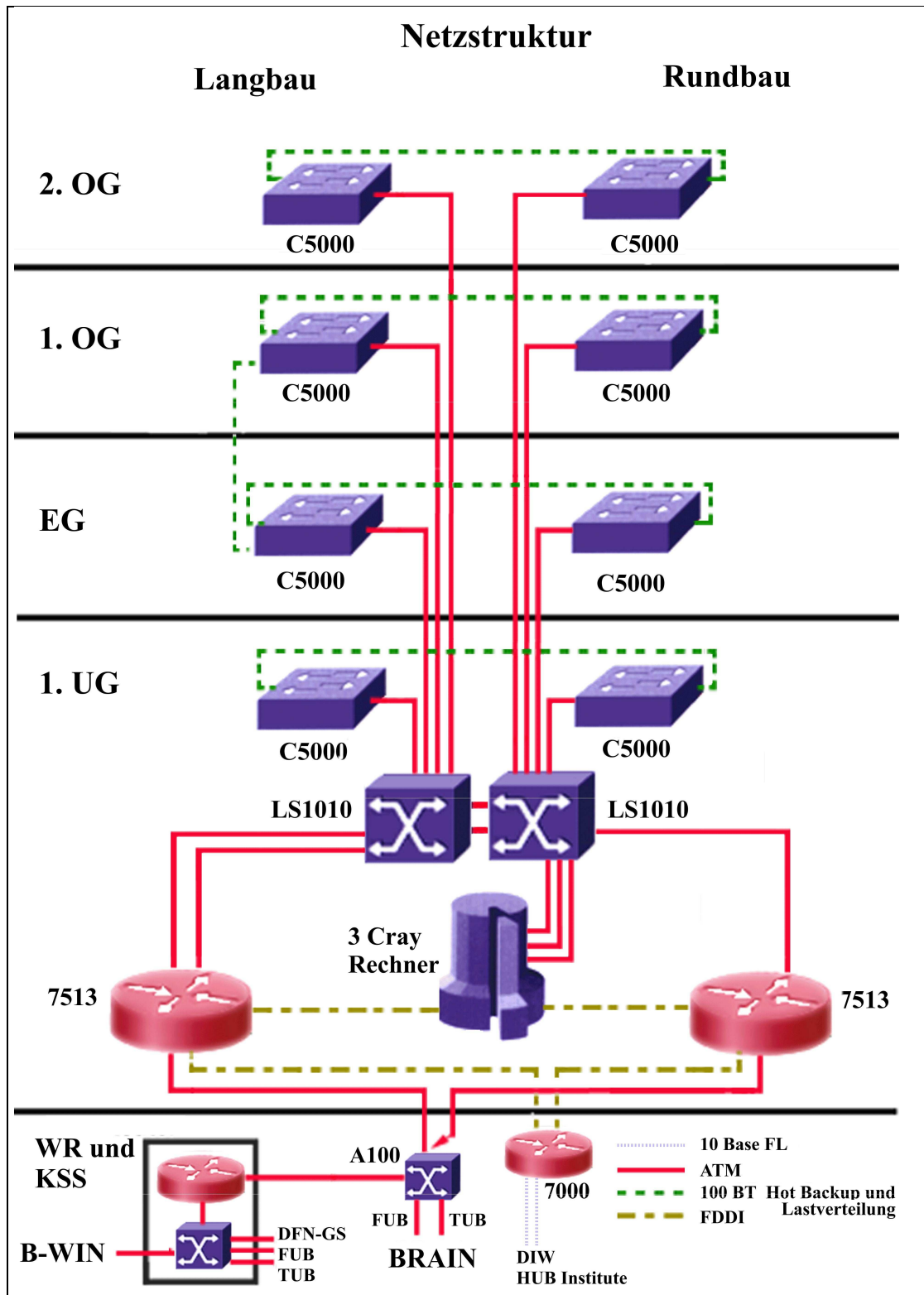


ABBILDUNG 4.3: Netzstruktur im ZIB

5 Publikationen

Die Veröffentlichungen sind abrufbar über

<http://www.zib.de/bib/pub>

und/oder

<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications>

5.1 Preprints

SC 97–01 Dimitrios I. Dais; Martin Henk; Günter M. Ziegler. *All Abelian Quotient C.I.-Singularities Admit Projective Crepant Resolutions in All Dimensions.*

Abstract: For Gorenstein quotient spaces \mathbb{C}^d/G , a direct generalization of the classical McKay correspondence in dimensions $d \geq 4$ would primarily demand the existence of projective, crepant desingularizations. Since this turned out to be not always possible, Reid asked about special classes of such quotient spaces which would satisfy the above property. We prove that the underlying spaces of all Gorenstein abelian quotient singularities, which are embeddable as complete intersections of hypersurfaces in an affine space, have torus-equivariant projective crepant resolutions in all dimensions. We use techniques from toric and discrete geometry.

SC 97–02 Christoph Helmberg; Robert Weismantel. *Cutting Plane Algorithms for Semidefinite Relaxations.*

Abstract: We investigate the potential and limits of interior point based cutting plane algorithms for semidefinite relaxations on basis of implementations for max-cut and quadratic 0-1 knapsack problems. Since the latter has not been described before we present the algorithm in detail and include numerical results.

SC 97–03 Marc C. Steinbach; H. Georg Bock; Georgii V. Kostin; Richard W. Longman. *Mathematical Optimization in Robotics: Towards Automated High Speed Motion Planning.*

Abstract: Industrial robots have greatly enhanced the performance of automated manufacturing processes during the last decades. International competition, however, creates an increasing demand to further improve both the accuracy of off-line programming and the resulting cycle times on production lines. To meet these objectives, validated dynamic robot models are required. We describe in detail the development of a generic dynamic model, specialize it to an actual industrial robot KUKA IR 761, and discuss the problem of dynamic calibration. Efficient and robust trajectory optimization algorithms are then presented which, when integrated into a CAD system, are suitable for routine application in an in-

dustrial environment. Our computational results for the KUKA IR 761 robot performing a real life transport maneuver show that considerable gains in productivity can be achieved by minimizing the cycle time.

- SC 97-04** Georg Ch. Pflug; Andrzej Ruszczyński; Rüdiger Schultz. *On the Glivenko-Cantelli Problem in Stochastic Programming: Mixed-Integer Linear Recourse.*

Abstract: Expected recourse functions in linear two-stage stochastic programs with mixed-integer second stage are approximated by estimating the underlying probability distribution via empirical measures. Under mild conditions, almost sure uniform convergence of the empirical means to the original expected recourse function is established.

- SC 97-05** Hans Christian Hege; Martin Seebaß; Detlev Stalling; Malte Zöckler. *A Generalized Marching Cubes Algorithm Based on Non-Binary Classifications.*

Abstract: We present a new technique for generating surface meshes from a uniform set of discrete samples. Our method extends the well-known marching cubes algorithm used for computing polygonal isosurfaces. While in marching cubes each vertex of a cubic grid cell is binary classified as lying above or below an isosurface, in our approach an arbitrary number of vertex classes can be specified. Consequently the resulting surfaces consist of patches separating volumes of two different classes each.

Similar to the marching cubes algorithm all grid cells are traversed and classified according to the number of different vertex classes involved and their arrangement. The solution for each configuration is computed based on a model that assigns probabilities to the vertices and interpolates them. We introduce an automatic method to find a triangulation which approximates the boundary surfaces - implicitly given by our model - in a topological correct way. Look-up tables guarantee a high performance of the algorithm.

In medical applications our method can be used to extract surfaces from a 3D segmentation of tomographic images into multiple tissue types. The resulting surfaces are well suited for subsequent volumetric mesh generation, which is needed for simulation as well as visualization tasks. The proposed algorithm provides a robust and unique solution, avoiding ambiguities occurring in other methods. The method is of great significance in modeling and animation too, where it can be used for polygonalization of non-manifold implicit surfaces.

- SC 97-06** Wolfram Koepf; Dieter Schmersau. *Representations of Orthogonal Polynomials.*

Abstract: Zeilberger's algorithm provides a method to compute recurrence and differential equations from given hypergeometric series representations, and an adaption of Almquist and Zeilberger computes recurrence and differential equations for hyperexponential integrals. Further versions of this algorithm allow the computation of recurrence and differential equations from Rodrigues type formulas and from generating functions. In particular, these algorithms can be used

to compute the differential/difference and recurrence equations for the classical continuous and discrete orthogonal polynomials from their hypergeometric representations, and from their Rodrigues representations and generating functions.

In recent work, we used an explicit formula for the recurrence equation of families of classical continuous and discrete orthogonal polynomials, in terms of the coefficients of their differential/difference equations, to give an algorithm to identify the polynomial system from a given recurrence equation.

In this article we extend these results by presenting a collection of algorithms with which any of the conversions between the differential/difference equation, the hypergeometric representation, and the recurrence equation is possible.

The main technique is again to use explicit formulas for structural identities of the given polynomial systems.

SC 97–07 Folkmar A. Bornemann; Christof Schütte. *On the Singular Limit of the Quantum-Classical Molecular Dynamics Model.*

Abstract: In molecular dynamics applications there is a growing interest in so-called *mixed quantum-classical* models. These models describe most atoms of the molecular system by the means of classical mechanics but an important, small portion of the system by the means of quantum mechanics. A particularly extensively used model, the QCMD model, consists of a *singularly perturbed* Schrödinger equation nonlinearly coupled to a classical Newtonian equation of motion.

This paper studies the singular limit of the QCMD model for finite dimensional Hilbert spaces. The main result states that this limit is given by the time-dependent Born-Oppenheimer model of quantum theory—provided the Hamiltonian under consideration has a smooth spectral decomposition. This result is strongly related to the *quantum adiabatic theorem*. The proof uses the method of *weak convergence* by directly discussing the density matrix instead of the wave functions. This technique avoids the discussion of highly oscillatory phases.

On the other hand, the limit of the QCMD model is of a different nature if the spectral decomposition of the Hamiltonian happens not to be smooth. We will present a generic example for which the limit set is not a unique trajectory of a limit dynamical system but rather a *funnel* consisting of infinitely many trajectories.

SC 97–08 Marc Mars; Thomas Wolf. *G_2 Perfect-Fluid Cosmologies with a proper conformal Killing vector.*

Appeared under the title ‘Diagonal and Non-diagonal G_2 Perfect-Fluid Cosmologies with a proper conformal Killing Vector’ in: *Class. Quantum Grav.* 14 (1997) pp. 1-28

Abstract: We study the Einstein field equations for spacetimes admitting a maximal two-dimensional abelian group of isometries acting orthogonally transitively on spacelike surfaces and, in addition, with at least one conformal Killing vector.

The three-dimensional conformal group is restricted to the case when the two-dimensional abelian isometry subalgebra is an ideal and it is also assumed to act on non-null hypersurfaces (both, spacelike and timelike cases are studied). We consider both, diagonal and non-diagonal metrics and find all the perfect-fluid solutions under these assumptions (except those already known). We find four families of solutions, each one containing arbitrary parameters for which no differential equations remain to be integrated. We write the line-elements in a simplified form and perform a detailed study for each of these solutions, giving the kinematical quantities of the fluid velocity vector, the energy-density and pressure, values of the parameters for which the energy conditions are fulfilled everywhere, the Petrov type, the singularities in the spacetimes and the Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker metrics contained in each family.

SC 97–09 Wolfgang K. Giloi. *Die Ungnade der frühen Geburt.*

Erschienen in: Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften : Berichte und Abhandlungen. Band 4. Berlin: Akademie Verl. 1997. S. 93-110

Zusammenfassung: Konrad Zuse ist unserem Land bekannt als der Computerpionier, der den ersten funktionstüchtigen Rechner in der Geschichte der Menschheit realisierte. Weniger bekannt ist aber immer noch die Tatsache, daß er mit seinem Plankalkül auch die erste höhere Programmiersprache der Welt entwickelte. Zuse hatte bereits 1945 nicht nur klare Vorstellungen über die Konzepte von höheren Programmiersprachen, sondern auch über die Programmierung von Anwendungen der künstlichen Intelligenz wie der relationalen Datenspeicherung oder dem Schachspiel. Dies macht ihn auch zum ersten Informatiker der Welt und darüber hinaus zum Erfinder der künstlichen Intelligenz.

SC 97–10 Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Fridolin Klostermeier; Christian Küttner. *Optimierung des Berliner Behindertenfahrdienstes.*

Erschienen in: Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung 2 (1997) 38-43

Zusammenfassung: In diesem Artikel geben wir einen Überblick über das Telebus-Projekt am Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin, durch das der Behindertenfahrdienst in Berlin reorganisiert und optimiert wurde. Wir berichten kurz über die mathematischen Probleme und, etwas ausführlicher, über die nicht-mathematischen Schwierigkeiten, die bei der Durchführung dieses Projektes auftraten.

SC 97–11 Norbert Ascheuer; Matteo Fischetti; Martin Grötschel. *A polyhedral study of the asymmetric travelling salesman problem with time windows.*

Abstract: The asymmetric travelling salesman problem with time windows (ATSP-TW) is a basic model for scheduling and routing applications. In this paper we present a formulation of the problem involving only 0/1-variables associated with the arcs of the underlying digraph. This has the advantage of avoiding additional variables as well as the associated (typically very ineffective) linking constraints. In the formulation, time window restrictions are modelled by means

of “infeasible path elimination” constraints. We present the basic form of these constraints along with some possible strengthenings. Several other classes of valid inequalities derived from related asymmetric travelling salesman problems are also described, along with a lifting theorem. We also study the ATSP-TW polytope, P_{TW} , defined as the convex hull of the integer solutions of our model. We show that determining the dimension of P_{TW} is strongly NP -complete problem, even if only one time window is present. In this latter case, we provide a minimal equation system for P_{TW} . Computational experiments on the new formulation are reported in a companion paper where we show that it outperforms alternative formulations on some classes of problem instances.

SC 97–12 Marc C. Steinbach. *Optimal Motion Design Using Inverse Dynamics.*

Abstract: Increasing demands on industrial robot operation call for optimal motion planning based on dynamic models. The resulting mathematical problems can be handled efficiently by sparse direct boundary value problem methods. Within this framework we propose a new solution technique that is closely related to the conventional kinematic approach: it eliminates the need for numerical integration of differential equations. First optimization results on a real life transport maneuver demonstrate that the technique may save over 50 % computation time.

SC 97–13 Martin Henk; Robert Weismantel. *Test sets of the knapsack problem and simultaneous diophantine approximation.*

Abstract: This paper deals with the study of test sets of the knapsack problem and simultaneous diophantine approximation. The Graver test set of the knapsack problem can be derived from minimal integral solutions of linear diophantine equations. We present best possible inequalities that must be satisfied by all minimal integral solutions of a linear diophantine equation and prove that for the corresponding cone the integer analogue of Caratheodory’s theorem applies when the numbers are divisible.

We show that the elements of the minimal Hilbert basis of the dual cone of all minimal integral solutions of a linear diophantine equation yield best approximations of a rational vector “from above”. A recursive algorithm for computing this Hilbert basis is discussed. We also outline an algorithm for determining a Hilbert basis of a family of cones associated with the knapsack problem.

SC 97–14 Ralf Borndörfer; Carlos E. Ferreira; Alexander Martin. *Matrix Decomposition by Branch-and-Cut.*

Abstract: In this paper we investigate whether matrices arising from linear or integer programming problems can be decomposed into so-called *bordered block diagonal form*. More precisely, given some matrix A , we try to assign as many rows as possible to some number of blocks of limited size such that no two rows assigned to different blocks intersect in a common column. Bordered block diagonal form is desirable because it can guide and speed up the solution process for linear and integer programming problems. We show that various matrices from the MIPLIB can indeed be decomposed into this form by computing optimal de-

compositions or decompositions with proven quality. These computations are done with a branch-and-cut algorithm based on polyhedral investigations of the matrix decomposition problem.

SC 97–15 Ralf Borndörfer; Carlos E. Ferreira; Alexander Martin. *Decomposing Matrices into Blocks*. (Revised version October 1997)

Abstract: In this paper we investigate whether matrices arising from linear or integer programming problems can be decomposed into so-called *bordered block diagonal form*. More precisely, given some matrix A , we try to assign as many rows as possible to some number of blocks of limited size such that no two rows assigned to different blocks intersect in a common column. Bordered block diagonal form is desirable because it can guide and speed up the solution process for linear and integer programming problems. We show that various matrices from the LP- and MIP-libraries NETLIB and MITLIB can indeed be decomposed into this form by computing optimal decompositions or decompositions with proven quality. These computations are done with a branch-and-cut algorithm based on polyhedral investigations of the matrix decomposition problem. In practice, however, one would use heuristics to find a good decomposition. We present several heuristic ideas and test their performance. Finally, we investigate the usefulness of optimal matrix decompositions into bordered block diagonal form for integer programming by using such decompositions to guide the branching process in a branch-and-cut code for general mixed integer programs.

SC 97–16 Andreas Löbel. *Experiments with a Dantzig-Wolfe Decomposition for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*.

Abstract: In this paper, we present a Dantzig-Wolfe decomposition for the NP -hard multiple-depot vehicle scheduling problem in public mass transit. It turned out that such a decomposition approach is an unsuitable method to solve such kind of multicommodity flow problems. The major obstacle to solve such problems is that the continuous master problem relaxations become too hard to be solved efficiently. Especially for problems with more than one thousand timetabled trips, the LU factorization in solving a restricted master problem takes far too much time. We will describe our computational experiments in detail and discuss the reasons why the decomposition method fails in this case.

Our computational investigations are based on real-world problems from the city of Hamburg with up to 2,283 timetabled trips. Our decomposition implementation is compared with a delayed column generation to solve the linear programming (LP) relaxation directly. This LP method can solve the LP relaxations of the integer linear programming formulation exactly for truly large-scale real-world problems of the cities of Berlin and Hamburg.

SC 97–17 Andreas Löbel. *Recent Computational Developments for Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*.

Abstract: This paper presents an integer linear programming approach with delayed column generation for the NP Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problem

(MDVSP) in public mass transit. We describe in detail all basic ingredients of our approach that are indispensable to solve truly large-scale real-world instances to optimality, and we report on computational investigations that are based on real-world instances from the city of Berlin, the city of Hamburg, and the region around Hamburg. These real-world instances have up to 25 thousand timetabled trips and 70 million dead-head trips.

Computational tests using the data of the Hamburger Hochbahn AG indicate savings of several vehicles and a cost reduction of about 10% compared with the solution provided by HOT II, the vehicle scheduling tool of the HanseCom GmbH, Hamburg. Parts of our algorithms are already integrated in the BERTA system of the Berliner Verkehrsbetriebe (BVG) and will soon be integrated in the MICRO-BUS system of the Gesellschaft für Informatik, Verkehrs- und Umweltplanung mbH (IVU), Berlin.

SC 97–18 Jens Lang; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch. *Three-Dimensional Fully Adaptive Solution of Thermo-Diffusive Flame Propagation Problems.*

Appeared in: Numerical Methods in Thermal Problems 10 (1997) 857-862

Abstract: In this paper we present a self-adaptive finite element method to solve flame propagation problems in 3D. An implicit time integrator of Rosenbrock type is coupled with a multilevel approach in space. The proposed method is applied to an unsteady thermo-diffusive combustion model to demonstrate its potential for the solution of complicated problems.

SC 97–19 Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On the $M(n)/M(m)/s$ Queue with impatient Calls.*

Abstract: The paper is concerned with the analysis of an s server queueing system in which the calls become impatient and leave the system if their waiting time exceeds their own patience. The individual patience times are assumed to be i.i.d. and arbitrary distributed. The arrival and service rate may depend on the number of calls in the system and in service, respectively. For this system, denoted by $M(n)/M(m)/s+GI$, where $m = \min(n, s)$ is the number of busy servers in the system, we derive a system of integral equations for the vector of the residual patience times of the waiting calls and their original maximal patience times. By solving these equations explicitly we get the stability condition and, for the steady state of the system, the occupancy distribution and various waiting time distributions. As an application of the $M(n)/M(m)/s + GI$ system we give a performance analysis of an Automatic Call Distributor system (ACD system) of finite capacity with outbound calls and impatient inbound calls, especially in case of patience times being the minimum of constant and exponentially distributed times.

SC 97–20 Ulrich Maas. *Efficient Calculation of Intrinsic Low-Dimensional Manifolds for the Simplification of Chemical Kinetics.*

Abstract: During the last years the interest in the numerical simulation of reacting flows has grown considerably and numerical methods are available, which

allow to couple chemical kinetics with flow and molecular transport. The use of detailed physical and chemical models, involving several hundred species, is restricted to very simple flow configurations like one-dimensional systems or two-dimensional systems with very simple geometries, and models are required, which simplify chemistry without sacrificing accuracy. One method to simplify the chemical kinetics is based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds (ILDm). They present attractors for the chemical kinetics, i.e. fast chemical processes relax towards them, and slow chemical processes represent movements within the manifolds. Thus the identification of the ILDMs allows a decoupling of the fast time scales. The concept has been verified by many different reacting flow calculations. However, one remaining problem of the method is the efficient calculation of the low-dimensional manifolds. This problem is addressed in this paper. We present an efficient, robust method, which allows to calculate intrinsic low-dimensional manifolds of chemical reaction systems. It is based on a multi-dimensional continuation process. Examples are shown for a typical combustion system. The method is not restricted to this class, but can be applied to other chemical systems, too.

SC 97–21 Károly Böröczky; Martin Henk. *Random Projections of Regular Polytopes*.

Abstract: Based on an approach of Affentranger&Schneider we give an asymptotic formula for the expected number of k -faces of the orthogonal projection of a regular n -crosspolytope onto a randomly chosen isotopic subspace of fixed dimension, as n tends to infinity. In particular, we present a precise asymptotic formula for the (spherical) volume of spherical regular simplices, which generalizes Daniel's formula.

SC 97–22 Dimitris Alevras; Martin Grötschel; Roland Wessäly. *Cost-Efficient Network Synthesis from Leased Lines*.

Abstract: Given a communication demand between each pair of nodes of a network we consider the problem of deciding what capacity to install on each edge of the network in order to minimize the building cost of the network and to satisfy the demand between each pair of nodes.

The feasible capacities that can be leased from a network provider are of a particular kind in our case. There are a few so-called basic capacities having the property that every basic capacity is an integral multiple of every smaller basic capacity. An edge can be equipped with a capacity only if it is an integer combination of the basic capacities. We treat, in addition, several restrictions on the routings of the demands (length restriction, diversification) and failures of single nodes or single edges. We formulate the problem as a mixed integer linear programming problem and develop a cutting plane algorithm as well as several heuristics to solve it. We report on computational results for real world data.

SC 97–23 Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Fridolin Klostermeier; Christian Küttner. *Telebus Berlin: Vehicle Scheduling in a Dial-a-Ride System*.

Abstract: *Telebus* is Berlin's dial-a-ride system for handicapped people that cannot use the public transportation system. The service is provided by a fleet of about 100 mini-busses and includes aid to get in and out of the vehicle. *Telebus* has between 1,000 and 1,500 transportation requests per day. The problem arises to schedule these requests into the vehicles such that punctual service is provided while operation costs should be minimum. Additional constraints include pre-rented vehicles, fixed bus driver shift lengths, obligatory breaks, and different vehicle capacities.

We use a *set partitioning* approach for the solution of the bus scheduling problem that consists of two steps. The first *clustering* step identifies segments of possible bus tours ("orders") such that more than one person is transported at a time; the aim in this step is to reduce the size of the problem and to make use of larger vehicle capacities. The problem to select a set of orders such that the traveling distance of the vehicles within the orders is minimal is a set partitioning problem that we can solve to optimality. In the second step the selected orders are *chained* to yield possible bus tours respecting all side constraints. The problem to select a set of such bus tours such that each order is serviced once and the total traveling distance of the vehicles is minimum is again a set partitioning problem that we solve approximately.

We have developed a computer system for the solution of the bus scheduling problem that includes a branch-and-cut algorithm for the solution of the set partitioning problems. A version of this system is in operation at *Telebus* since July 1995. Its use made it possible that *Telebus* can service today about 30% more requests per day for the same amount of money than before.

SC 97-24 Dimitris Alevras; Martin Grötschel; Roland Wessäly. *Capacity and Survivability Models for Telecommunication Networks*.

Abstract: Designing low-cost networks that survive certain failure situations is one of the prime tasks in the telecommunication industry. In this paper we survey the development of models for network survivability used in practice in the last ten years. We show how algorithms integrating polyhedral combinatorics, linear programming, and various heuristic ideas can help solve real-world network dimensioning instances to optimality or within reasonable quality guarantees in acceptable running times.

The most general problem type we address is the following. Let a communication demand between each pair of nodes of a telecommunication network be given. We consider the problem of choosing, among a discrete set of possible capacities, which capacity to install on each of the possible edges of the network in order to

- (i) satisfy all demands,
- (ii) minimize the building cost of the network. In addition to determining the network topology and the edge capacities we have to provide, for each demand, a routing such that
- (iii) no path can carry more than a given percentage of the demand,

(iv) no path in the routing exceeds a given length. We also have to make sure that (v) for every single node or edge failure, a certain percentage of the demand is reroutable. Moreover, for all failure situations feasible routings must be computed.

The model described above has been developed in cooperation with a German mobile phone provider. We present a mixed-integer programming formulation of this model and computational results with data from practice.

SC 97–25 Wolfgang Dalitz; Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Information Services for Mathematics in the Internet (Math-Net)*.

Abstract: The present paper gives a brief description of the Math-Net project which is carried out by nine mathematical institutions in Germany, supported by Deutsches Forschungsnetz (DFN) and Deutsche Telekom. The project aims at setting up the technical and organizational infrastructure for efficient, inexpensive and user-driven information services for mathematics. With the aid of active (structured retrieval mechanisms) and passive (profile services) components, electronic mathematical information in Germany will be made available to the scientist at his workplace. The emphasis is put on information about publications, software and data collections, teaching and research activities, but also on organizational and bibliographical information. Decentral organization structures, distributed search systems as well as the use of meta-information (metadata) in accordance with the Dublin Core (hopefully) guarantee a longterm, high-quality repository of data. The well-known mathematical software and data collection *netlib* will be used as an example to illustrate how such a collection can be adapted to Math-Net. An integration of *netlib* into HyperWave offers additional perspectives and functionalities.

SC 97–26 P. Deufflhard, M. Seebaß, D. Stalling, R. Beck, H.-C. Hege. *Hyperthermia Treatment Planning in Clinical Cancer Therapy: Modelling, Simulation, and Visualization*.

Abstract: The speaker and his co-workers in *Scientific Computing and Visualization* have established a close cooperation with medical doctors at the Rudolf–Virchow–Klinikum of the Humboldt University in Berlin on the topic of *regional hyperthermia*. In order to permit a patient–specific treatment planning, a special software system (HyperPlan) has been developed. A mathematical model of the clinical system (*radio frequency applicator with 8 antennas, water bolus, individual patient body*) involves Maxwell’s equations in inhomogeneous media and a so–called bio–heat transfer PDE describing the temperature distribution in the human body. The electromagnetic field and the thermal phenomena need to be computed at a speed suitable for the clinical environment. An individual geometric patient model is generated as a quite complicated tetrahedral “coarse” grid (several thousands of nodes). Both Maxwell’s equations and the bio–heat transfer equation are solved on that 3D–grid by means of *adaptive* multilevel finite element methods, which automatically refine the grid where necessary in view

of the required accuracy. Finally optimal antenna parameters for the applicator are determined. All steps of the planning process are supported by powerful *visualization* methods. Medical images, contours, grids, simulated electromagnetic fields and temperature distributions can be displayed in combination. A number of new algorithms and techniques had to be developed and implemented. Special emphasis has been put on advanced 3D interaction methods and user interface issues.

SC 97–27 Andreas Eisenblätter. *A Frequency Assignment Problem in Cellular Phone Networks.*

Abstract: We present a mathematical formulation of a *frequency assignment problem* encountered in cellular phone networks: frequencies have to be assigned to stationary transceivers (carriers) such that as little interference as possible is induced while obeying several technical and legal restrictions.

The optimization problem is NP-hard, and no good approximation can be guaranteed—unless $P = NP$. We sketch some starting and improvement heuristics, and report on their successful application for solving the frequency assignment problem under consideration. Computational results on real-world instances with up to 2877 carriers and 50 frequencies are presented.

SC 97–28 Zsolt Tuza; Annegret Wagler. *Minimally non-preperfect graphs of small maximum degree.*

Abstract: A graph G is called preperfect if each induced subgraph $G' \subseteq G$ of order at least 2 has two vertices x, y such that either all maximum cliques of G' containing x contain y , or all maximum independent sets of G' containing y contain x , too. Giving a partial answer to a problem of Hammer and Maffray [Combinatorica 13 (1993), 199-208], we describe new classes of minimally non-preperfect graphs, and prove the following characterizations:

- (i) A graph of maximum degree 4 is minimally non-preperfect if and only if it is an odd cycle of length at least 5, or the complement of a cycle of length 7, or the line graph of a 3-regular 3-connected bipartite graph.
- (ii) If a graph G is not an odd cycle and has no isolated vertices, then its line graph is minimally non-preperfect if and only if G is bipartite, 3-edge-connected, regular of degree d for some $d \geq 3$, and contains no 3-edge-connected d' -regular subgraph for any $3 \leq d' \leq d$.

SC 97–29 Martin Henk; Robert Weismantel. *Hilbert bases of cones related to simultaneous Diophantine approximations and linear Diophantine equations.*

Abstract: This paper investigates properties of the minimal integral solutions of a linear diophantine equation. We present best possible inequalities that must be satisfied by these elements which improves on former results. We also show that the elements of the minimal Hilbert basis of the dual cone of all minimal integral solutions of a linear diophantine equation yield best approximations of a rational

vector “from above”. Relations between these cones are applied to the knapsack problem.

SC 97–30 Ralf Borndörfer; Robert Weismantel. *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*.

Abstract: This paper is about *set packing relaxations* of combinatorial optimization problems associated with acyclic digraphs and linear orderings, cuts and multicuts, and vertex packings themselves. Families of inequalities that are valid for such a relaxation as well as the associated separation routines carry over to the problems under investigation.

SC 97–31 Zsolt Tuza. *Graph coloring with local constraints - A survey*.

Appeared in: *Discussiones Mathematicae - Graph Theory* 17, No. 2 (1997) pp. 161-228

Abstract: We survey the literature on those variants of the *chromatic number* problem where not only a proper coloring has to be found (i.e., adjacent vertices must not receive the same color) but some further local restrictions are imposed on the color assignment. Mostly, the *list colorings* and the *precoloring extensions* are considered.

In one of the most general formulations, a graph $G = (V, E)$, sets $L(v)$ of admissible colors, and natural numbers c_v for the vertices $v \in V$ are given, and the question is whether there can be chosen a subset $C(v) \subseteq L(v)$ of cardinality c_v for each vertex in such a way that the sets $C(v), C(v')$ are disjoint for each pair v, v' of adjacent vertices. The particular case of constant $|L(v)|$ with $c_v = 1$ for all $v \in V$ leads to the concept of *choice number*, a graph parameter showing unexpectedly different behavior compared to the chromatic number, despite these two invariants have nearly the same value for almost all graphs.

To illustrate typical techniques, some of the proofs are sketched.

SC 97–32 Ingo Schiermeyer; Zsolt Tuza; Margit Voigt. *On-line rankings of graphs*.

Abstract: A (vertex) k -ranking of a graph $G = (V, E)$ is a mapping $\mathbf{p} : V \rightarrow \{1, \dots, k\}$ such that each path with endvertices of the same color i contains an internal vertex of color $\geq i + 1$. In the on-line coloring algorithms, the vertices v_1, \dots, v_n arrive one by one in an unrestricted order, and only the edges inside the set $\{v_1, \dots, v_i\}$ are known when the color of v_i has to be chosen. We characterize those graphs for which a 3-ranking can be found on-line. We also prove that the greedy (First-Fit) on-line algorithm, assigning the smallest feasible color to the next vertex at each step, generates a $(3 \log_2 n)$ -ranking for the path with $n \geq 2$ vertices, independently of the order in which the vertices are received.

SC 97–33 Zsolt Tuza; Vitaly I. Voloshin. *Uncolorable mixed hypergraphs*.

Abstract: A mixed hypergraph $\mathcal{H} = (X, \mathcal{A}, \mathcal{E})$ consists of the vertex set X and two families of subsets: the family of edges \mathcal{E} and the family of co-edges \mathcal{A} . In a coloring every edge $E \in \mathcal{E}$ has at least two vertices of different colors, while every co-edge $A \in \mathcal{A}$ has at least two vertices of the same color. The smallest

(largest) number of colors for which there exists a coloring of a mixed hypergraph \mathcal{H} using all the colors is called the lower (upper) chromatic number and is denoted $\chi(\mathcal{H})$ ($\bar{\chi}(\mathcal{H})$). A mixed hypergraph is called uncolorable if it admits no coloring.

We show that there exist uncolorable mixed hypergraphs $\mathcal{H} = (X, \mathcal{A}, \mathcal{E})$ with arbitrary difference between the upper chromatic number $\bar{\chi}(\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$ of $\mathcal{H}_{\mathcal{A}} = (X, \mathcal{A})$ and the lower chromatic number $\chi(\mathcal{H}_{\mathcal{E}})$ of $\mathcal{H}_{\mathcal{E}} = (X, \mathcal{E})$. Moreover, for any $k = \bar{\chi}(\mathcal{H}_{\mathcal{A}}) - \chi(\mathcal{H}_{\mathcal{E}})$, the minimum number $v(k)$ of vertices of an inclusion-wise minimal uncolorable mixed hypergraph is exactly $k + 4$.

We introduce the measure of uncolorability which is called the vertex uncolorability number and propose a greedy algorithm that finds an estimate on it, and is a mixed hypergraph coloring heuristic at the same time.

We show that the colorability problem can be expressed as an integer linear programming problem.

Concerning particular cases, we describe those complete (l, m) -uniform mixed hypergraphs which are uncolorable, and observe that for given (l, m) almost all complete (l, m) -uniform mixed hypergraphs are uncolorable, whereas generally almost all complete mixed hypergraphs are colorable.

SC 97–34 Jan Kratochvíl; Zsolt Tuza. *Rankings of directed graphs.*

Abstract: A ranking of a graph is a coloring of the vertex set with positive integers such that on every path connecting two vertices of the same color, there is a vertex of larger color. We consider the directed variant of this problem, where the above condition is imposed only on those paths in which all edges are oriented in the same direction. We show that the ranking number of a directed tree is bounded by that of its longest directed path plus one, and that it can be computed in polynomial time. Unlike the undirected case, however, deciding if the ranking number of a directed (and even of an acyclic directed) graph is bounded by a constant is NP-complete. In fact, the 3-ranking of planar bipartite acyclic digraphs is already hard.

SC 97–35 Ralf Borndörfer; Andreas Eisenblätter; Martin Grötschel; Alexander Martin. *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks.*

Abstract: We present a graph-theoretic model for the *frequency assignment problem* in Cellular Phone Networks: Obeying several technical and legal restrictions, frequencies have to be assigned to transceivers so that interference is as small as possible. This optimization problem is NP-hard. Good approximation cannot be guaranteed, unless $P = NP$.

We describe several assignment heuristics. These heuristics are simple and not too hard to implement. We give an assessment of the heuristics' efficiency and practical usefulness. For this purpose, typical instances of frequency assignment problems with up to 4240 transceivers and 75 frequencies of a German cellular phone network operator are used. The results are satisfying from a practitioner's

point of view. The best performing heuristics were integrated into a network planning system used in practice.

SC 97–36 Konstantin Lipnikov; Peter Deuffhard. *Domain Decomposition with Subdomain CCG for Material Jump Elliptic Problems.*

Abstract: A combination of the cascadic conjugate gradient (CCG) method for homogeneous problems with a non-overlapping domain decomposition (DD) method is studied. Mortar finite elements on interfaces are applied to permit non-matching grids in neighboring subdomains. For material jump problems, the method is designed as an alternative to the cascadic methods.

SC 97–37 Christoph Helmberg; Franz Rendl. *A Spectral Bundle Method for Semidefinite Programming.*

Abstract: A central drawback of interior point methods for semidefinite programs is their lack of ability to exploit problem structure in cost and coefficient matrices. This restricts applicability to problems of small dimension. Typically semidefinite relaxations arising in combinatorial applications have sparse and well structured cost and coefficient matrices of huge order. We present a method that allows to compute acceptable approximations to the optimal solution of large problems within reasonable time.

Semidefinite programming problems with constant trace on the primal feasible set are equivalent to eigenvalue optimization problems. These are convex non-smooth programming problems and can be solved by bundle methods. We propose to replace the traditional polyhedral cutting plane model constructed by means of subgradient information by a semidefinite model that is tailored for eigenvalue problems. Convergence follows from the traditional approach but a proof is included for completeness. We present numerical examples demonstrating the efficacy of the approach on combinatorial examples.

SC 97–38 Alexander Martin; Robert Weismantel. *Contributions to General Mixed Integer Knapsack Problems.*

Abstract: This paper deals with a general mixed integer knapsack polyhedron for which we introduce and analyze a new family of inequalities. We discuss the value of this family both from a theoretic and a computational point of view.

SC 97–39 Dimitrios I. Dais; Martin Henk. *On a series of Gorenstein cyclic quotient singularities admitting a unique projective crepant resolution.*

Abstract: Let G be a finite subgroup of $\mathrm{SL}(r, \mathbb{C})$. In dimensions $r = 2$ and $r = 3$, McKay correspondence provides a natural bijection between the set of irreducible representations of G and a cohomology-ring basis of the overlying space of a projective, crepant desingularization of \mathbb{C}^r/G . For $r = 2$ this desingularization is unique and is known to be determined by the Hilbert scheme of the G -orbits. Similar statements (including a method of distinguishing just *one* among all possible smooth minimal models of \mathbb{C}^3/G), are very probably true for all G 's $\subset \mathrm{SL}(3, \mathbb{C})$ too, and recent Hilbert-scheme-techniques due to Ito, Naka-

mura and Reid, are expected to lead to a new fascinating uniform theory. For dimensions $r \geq 4$, however, to apply analogous techniques one needs extra modifications. In addition, minimal models of \mathbb{C}^r/G are smooth only under special circumstances. $\mathbb{C}^4/(\text{involution})$, for instance, cannot have any smooth minimal model. On the other hand, all abelian quotient spaces which are c.i.'s can always be fully resolved by torus-equivariant, crepant, projective morphisms. Hence, from the very beginning, the question whether a given Gorenstein quotient space \mathbb{C}^r/G , $r \geq 4$, admits special desingularizations of this kind, seems to be absolutely crucial. In the present paper, after a brief introduction to the existence-problem of such desingularizations (for abelian G 's) from the point of view of toric geometry, we prove that the Gorenstein cyclic quotient singularities of type

$$\frac{1}{l} (1, \dots, 1, l - (r - 1))$$

with $l \geq r \geq 2$, have a *unique* torus-equivariant projective, crepant, partial resolution, which is "full" iff either $l \equiv 0 \pmod{r-1}$ or $l \equiv 1 \pmod{r-1}$. As it turns out, if one of these two conditions is fulfilled, then the exceptional locus of the full desingularization consists of $\lfloor \frac{l}{r-1} \rfloor$ prime divisors, $\lfloor \frac{l}{r-1} \rfloor - 1$ of which are isomorphic to the total spaces of $\mathbb{P}_{\mathbb{C}}^1$ -bundles over $\mathbb{P}_{\mathbb{C}}^{r-2}$. Moreover, it is shown that intersection numbers are computable explicitly and that the resolution morphism can be viewed as a composite of successive (normalized) blow-ups. Obviously, the monopermetrized singularity-series of the above type contains (as its "first member") the well-known Gorenstein singularity defined by the origin of the affine cone which lies over the r -tuple Veronese embedding of $\mathbb{P}_{\mathbb{C}}^{r-1}$.

SC 97-40 Jens Lang; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch. *Adaptive Time-Space Discretization for Combustion Problems*.

Appeared in: 15th IMACS World Congress on Scientific Computation: Modeling and Applied Mathematics, Berlin, August 1997. Achim Sydow (ed.) Berlin: Wissenschaft und Technik Verl. 1997, pp. 149-155

Abstract: We present a self-adaptive finite element method to solve combustion problems in 1D, 2D, and 3D. An implicit time integrator of Rosenbrock type is coupled with a multilevel approach in space. A posteriori error estimates are obtained by constructing locally higher order solutions involving all variables of the problem. Adaptive strategies such as step size control, spatial refinement and coarsening allow us to get economically an accurate solution. Various examples are presented to demonstrate practical applications of the proposed method.

SC 97-41 Christof Schütte; Folkmar A. Bornemann. *Approximation Properties and Limits of the Quantum-Classical Molecular Dynamics Model*.

Abstract: In molecular dynamics applications there is a growing interest in including quantum effects for simulations of larger molecules. This paper is concerned with *mixed quantum-classical* models which are currently discussed: the so-called QCMD model with variants and the time-dependent Born-Oppenheimer

approximation. All these models are known to approximate the full quantum dynamical evolution—under different assumptions, however. We review the meaning of these assumptions and the scope of the approximation. In particular, we characterize those typical problematic situations where a mixed model might largely deviate from the full quantum evolution. One such situation of specific interest, a non-adiabatic excitation at certain energy level crossings, can promisingly be dealt with by a modification of the QCMD model that we suggest.

SC 97–42 Peter Nettesheim; Christof Schütte. *Numerical Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics.*

Abstract: It was revealed that the QCMD model is of canonical Hamiltonian form with symplectic structure, which implies the conservation of energy. An efficient and reliable integrator for transferring these properties to the discrete solution is the symplectic and explicit PICKABACK algorithm. The only drawback of this kind of integrator is the small stepsize in time induced by the splitting techniques used to discretize the quantum evolution operator. Recent investigations concerning Krylov iteration techniques result in alternative approaches which overcome this difficulty for a wide range of problems. By using iterative methods in the evaluation of the quantum time propagator, these techniques allow for the stepsize to adapt to the coupling between the classical and the quantum mechanical subsystem. This yields a drastic reduction of the numerical effort. The pros and cons of both approaches as well as the suitable applications are discussed in the last part.

SC 97–43 Rainald Ehrig; Ulrich Nowak ; Peter Deuffhard. *Massively Parallel Linearly-Implicit Extrapolation Algorithms as a Powerful Tool in Process Simulation.*

Abstract: We study the parallelization of linearly-implicit extrapolation codes for the solution of large scale PDE systems and differential algebraic equations on distributed memory machines. The main advantage of these algorithms is that they enable adaptivity both in time and space. Additive Krylov-Schwarz methods yield high parallel performance for such extrapolation methods. Our approach combines a slightly overlapping domain decomposition together with a polynomial block Neumann preconditioner and a reduced system technique. Furthermore we get important advantages through the explicit computation of the matrix-products of the preconditioner and the matrix of the linear system. The parallel algorithms exhibit scalability up to 64 processors already for medium-sized test problems. We show that the codes are really efficient in large application systems for chemical engineering problems.

SC 97–44 Bodo Erdmann; Jens Lang; Martin Seebaß. *Adaptive Solutions of Nonlinear Parabolic Equations with Application to Hyperthermia Treatments.*

Abstract: We present a self-adaptive finite element method to solve nonlinear evolution problems in 3D. An implicit time integrator of Rosenbrock type is coupled with a multilevel approach in space. The proposed method is applied to hy-

perthermia treatments to demonstrate its potential for the solving of complicated problems.

SC 97–45 Ralf Kornhuber. *Globally Convergent Multigrid Methods for Porous Medium Type Problems.*

Abstract: We consider the fast solution of large, piecewise smooth minimization problems as typically arising from the finite element discretization of porous media flow. For lack of smoothness, usual Newton multigrid methods cannot be applied. We propose a new approach based on a combination of convex minimization with *constrained* Newton linearization. No regularization is involved. We show global convergence of the resulting monotone multigrid methods and give logarithmic upper bounds for the asymptotic convergence rates.

SC 97–46 Annegret Wagler. *Critical Edges in Perfect Graphs and Some Polyhedral Consequences.*

Abstract: An edge e of a perfect graph G is called critical if $G - e$ is imperfect. For certain graphs $G - e$ of this type, we determine all minimally imperfect subgraphs. We use this knowledge to describe inequalities inducing facets of the stable set polytope associated with $G - e$.

SC 97–47 Jens Lang and Wilhelm Merz. *Numerical Simulation of Single Species Dopant Diffusion in Silicon under Extrinsic Conditions.*

Abstract: In this article we consider a general model for phosphorus diffusion in silicon under extrinsic doping conditions. At such high concentrations we have to include the charged species and the internal electric field of the crystal, both of which can have profound effects on diffusion. In principle, this leads to a very large number of drift–diffusion–reaction equations: one for each charge state of every species, plus one Poisson equation to describe the internal electric field (in terms of the electron/hole concentration). The number of equations can be reduced substantially by making additional assumptions on the distribution of charge states and local equilibrium assumptions concerning the reaction terms. The resulting model turns out to be very interesting for numerical investigation. We solve the problem numerically in two space dimensions with the adaptive finite element program KARDOS and describe the numerical method used here to treat the resulting drift–diffusion–reaction problem.

SC 97–48 Folkmar A. Bornemann. *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Conservative Mechanical Systems.*

Abstract: We present a particular method for the explicit elimination of rapidly oscillating micro-scales in certain singularly perturbed conservative mechanical systems. Non-linear effects call for a non-trivial averaging procedure that we call *homogenization in time*. This method is based on energy principles and weak convergence techniques. Since non-linear functionals are in general *not* weakly sequentially continuous, we have to study *simultaneously* the weak limits of all those non-linear quantities of the rapidly oscillating components which are of im-

portance for the underlying problem. Using the physically motivated concepts of *virial theorems*, *adiabatic invariants*, and *resonances*, we will be able to establish sufficiently many relations between all these weak limits, allowing to calculate them explicitly. Our approach will be *paradigmatical* rather than aiming at the largest possible generality. This way, we can show most clearly how concepts and notions from the physical background of the underlying mathematical problem enter and help to determine relations between weak limit quantities. In detail we will discuss natural mechanical systems with a strong constraining potential on Riemannian manifolds, the questions of realization of holonomic constraints, and singular limits of mixed quantum-classical coupling models. This latter class of problems also leads to a new proof for the adiabatic theorem of quantum mechanics. The strength of our methodology will be illustrated by applications to problems from plasma physics, molecular dynamics and quantum chemistry.

SC 97–49 Sebastian Reich. *Modified Potential Energy Functions for Constrained Molecular Dynamics.*

Abstract: In molecular dynamics the highly oscillatory vibrations in the chemical bonds are often replaced by holonomic constraints that freeze the bond length/angle to its equilibrium value. In some cases this approach can be justified if the force constants of the bond vibrations are sufficiently large. However, for moderate values of the force constant, the constrained system might lead to a dynamical behavior that is too “rigid” compared to the flexible model. To compensate for this effect, the concept of soft constraints was introduced [Reich 1997, Reich 1995, Reich 1996]. However, its implementation is rather expensive. In this paper, we suggest an alternative approach that modifies the force field instead of the constraint functions. This leads to a more efficient method that avoids the resonance induced instabilities of multiple-time-stepping [Bishop 1996] and the above described effect of standard constrained dynamics.

SC 97–50 Uri Ascher; Sebastian Reich. *On Some Difficulties in Integrating Highly Oscillatory Hamiltonian Systems.*

Abstract: The numerical integration of highly oscillatory Hamiltonian systems, such as those arising in molecular dynamics or Hamiltonian partial differential equations, is a challenging task. Various methods have been suggested to overcome the step-size restrictions of explicit methods such as the Verlet method. Among these are multiple-time-stepping, constrained dynamics, and implicit methods. In this paper, we investigate the suitability of time-reversible, semi-implicit methods. Here semi-implicit means that only the highly oscillatory part is integrated by an implicit method such as the midpoint method or an energy-conserving variant of it. The hope is that such methods will allow one to use a step-size k which is much larger than the period ε of the fast oscillations.

However, our results are discouraging. Even in the absence of resonance-type instabilities, we show that in general one must require that k^2/ε be small enough. Otherwise the method might become unstable and/or it might lead to a wrong

approximation of the slowly varying solution components. The latter situation might, in some cases, even require that k/ε be small in order to avoid this danger. While certain (semi-implicit) energy conserving methods prove to be robust for some model problems, they may also yield deceptively-looking, wrong solutions for other simple model problems, in circumstances where the corresponding constrained dynamics formulation may not be easily derived and used.

SC 97–51 Uri Ascher; Sebastian Reich. *The midpoint scheme and variants for Hamiltonian systems: advantages and pitfalls.*

Abstract: The (implicit) midpoint scheme, like higher order Gauss-collocation schemes, is algebraically stable and symplectic, and it preserves quadratic integral invariants. It may appear particularly suitable for the numerical solution of highly oscillatory Hamiltonian systems, such as those arising in molecular dynamics or structural mechanics, because there is no stability restriction when it is applied to a simple harmonic oscillator. Although it is well-known that the midpoint scheme may also exhibit instabilities in various stiff situations, one might still hope for good results when resonance-type instabilities are avoided. In this paper we investigate the suitability of the midpoint scheme for highly oscillatory, frictionless mechanical systems, where the step-size k is much larger than the system's small parameter ε , in case that the solution remains bounded as $\varepsilon \rightarrow 0$. We show that in general one must require that k^2/ε be small enough, or else, even the errors in slowly varying quantities like the energy may grow undesirably (especially when fast and slow modes are tightly coupled) or, worse, the computation may yield misleading information. In some cases this may already happen when $k = O(\varepsilon)$. The same holds for higher order collocation at Gaussian points. The encountered restrictions on k are still better than the corresponding ones for explicit schemes.

SC 97–52 Sebastian Reich. *Preservation of Adiabatic Invariants under Symplectic Discretization.*

Abstract: Symplectic methods, like the Verlet method, are a standard tool for the long term integration of Hamiltonian systems as they arise, for example, in molecular dynamics. One of the reasons for the popularity of symplectic methods is the conservation of energy over very long periods of time up to small fluctuations that scale with the order of the method. In this paper, we discuss a qualitative feature of Hamiltonian systems with separated time scales that is also preserved under symplectic discretization. Specifically, highly oscillatory degrees of freedom often lead to almost preserved quantities (adiabatic invariants). Using recent results from backward error analysis and normal form theory, we show that a symplectic method, like the Verlet method, preserves those adiabatic invariants. We also discuss step-size restrictions necessary to maintain adiabatic invariants in practical computations.

SC 97–53 E. Barth; B. Leimkuhler; Sebastian Reich. *A Time-Reversible Variable-Stepsize Integrator for Constrained Dynamics.*

Abstract: This article considers the design and implementation of variable-timestep methods for simulating holonomically constrained mechanical systems. Symplectic variable stepsizes are briefly discussed, we then consider time-reparameterization techniques employing a time-reversible (symmetric) integration method to solve the equations of motion. We give several numerical examples, including a simulation of an elastic (inextensible, unshearable) rod undergoing large deformations and collisions with the sides of a bounding box. Numerical experiments indicate that adaptive stepping can significantly smooth the numerical energy and improve the overall efficiency of the simulation.

SC 97–54 Ralf Borndörfer; Robert Weismantel. *Relations Among Some Combinatorial Programs.*

Abstract: This paper investigates *relations* among combinatorial optimization problems. To establish such relations we introduce a transformation technique—*aggregation*—that allows to relax an integer program by means of another integer program. We prove that various families of prominent inequalities for the acyclic subdigraph problem, the multiple knapsack problem, the max cut, graph, and the clique partitioning problem, the set covering problem, and the set packing problem can be derived and separated in polynomial time in this way. Our technique is algorithmic. It has been implemented and used in a set partitioning code.

SC 97–55 Peter Deuffhard; Tilmann Friese; Frank Schmidt. *A Nonlinear Multigrid Eigenproblem Solver for the Complex Helmholtz Equation.*

Abstract: The paper is motivated by the need for a fast robust adaptive multigrid method to solve complex Helmholtz eigenvalue problems arising from the design of optical chips. A nonlinear multigrid method is developed, which can be regarded as an extension of a previous adaptive Rayleigh quotient minimization method for selfadjoint Helmholtz eigenproblems. Since the complex Helmholtz operator is just a compact nonselfadjoint perturbation of a selfadjoint operator, linear algebra techniques like Schur decomposition can be extended from the finite dimensional case. The efficiency of the derived adaptive nonlinear multigrid method is illustrated by computations for a technologically relevant integrated optics component containing Multi Quantum Well Layers.

SC 97–56 Peter Nettesheim; Sebastian Reich. *Symplectic Multiple-Time-Stepping Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics.*

Abstract: The overall Hamiltonian structure of the Quantum-Classical Molecular Dynamics model makes - analogously to classical molecular dynamics - symplectic integration schemes the methods of choice for long-term simulations. This has already been demonstrated by the symplectic PICKABACK method. However, this method requires a relatively small step-size due to the high-frequency quantum modes. Therefore, following related ideas from classical molecular dynamics, we investigate symplectic multiple-time-stepping methods and indicate various possibilities to overcome the step-size limitation of PICKABACK.

SC 97–57 Tilmann Friese. *On the Computation of Eigenmodes of Integrated Optical Components.*

Abstract: The paper deals with the solution of the eigenvalue problem of the complex Helmholtz equation. We concentrate on multigrid methods for solving the algebraic eigenproblems arising from discretization with finite elements by using adaptive generated meshes. An illustrative numerical example, the simulation of a waveguide structure from integrated optics, is included.

SC 97–58 Thomas Wolf. *Killing Pairs in Flat Space.*

Abstract: In this paper the integrability conditions for Killing pairs in flat spaces are investigated and it is shown that only trivial Killing pairs exist.

SC 97–59 Bodo Erdmann; Jens Lang; Martin Seebaß. *Optimization of Temperature Distributions for Regional Hyperthermia Based on a Nonlinear Heat Transfer Model.*

Abstract: We describe an optimization process specially designed for regional hyperthermia of deep seated tumors in order to achieve desired steady-state temperature distributions. A nonlinear three-dimensional heat-transfer model based on temperature-dependent blood perfusion is applied to predict the temperature. Optimal heating is obtained by minimizing an integral object function which measures the distance between desired and model predicted temperatures. Sequential minima are calculated from successively improved constant-rate perfusion models employing a damped Newton method in an inner iteration. Numerical results for a Sigma 60 applicator are presented.

This work has been supported by Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) within the Sonderforschungsbereich 273 „Hyperthermie: Methodik und Klinik“.

SC 97–60 Frank Schmidt. *Construction of Discrete Transparent Boundary Conditions for Schrödinger-Type Equations.*

Abstract: We present a general technique for constructing nonlocal transparent boundary conditions for time-discretized one-dimensional Schrödinger type equations. The main tool of construction is the discrete counterpart to Mikuśiński’s continuous algebraic operator approach. Existing techniques are simplified and generalized. Both adaptive time-steps and time-dependent exterior potentials are taken into account.

SC 97–61 Alexander Martin; Robert Weismantel. *The Intersection of Knapsack Polyhedra and Extensions.*

Abstract: This paper introduces a scheme of deriving strong cutting planes for a general integer programming problem. The scheme is related to Chvatal-Gomory cutting planes and important special cases such as odd hole and clique inequalities for the stable set polyhedron or families of inequalities for the knapsack polyhedron. We analyze how relations between covering and incomparability numbers associated with the matrix can be used to bound coefficients in these inequalities. For the intersection of several knapsack polyhedra, incomparabilities bet-

ween the column vectors of the associated matrix will be shown to transfer into inequalities of the associated polyhedron. Our scheme has been incorporated into the mixed integer programming code SIP. About experimental results will be reported.

SC 97–62 Thomas Wolf. *Structural equations for Killing tensors of arbitrary rank.*

Abstract: An algorithm is given for bringing the equations of monomial first integrals of arbitrary degree of the geodesic motion in a Riemannian space V_n into the form $(F_A)_{;k} = \sum_B \Gamma_{kAB} F_B$. The F_A are the components of a Killing tensor $K_{i_1 \dots i_r}$ of arbitrary rank r and its symmetrized covariant derivatives. Explicit formulas are given for rank 1, 2 and 3. Killing tensor equations in structural form allow the formulation of algebraic integrability conditions and are supposed to be well suited for integration as it is demonstrated in the case of flat space. An alternative proof of the reducibility of these Killing tensors is given which shows the correspondence to structural equations for rank 2 Killing tensors as formulated by Hauser & Malhiot. They used tensors with different symmetry properties.

SC 97–63 Rainald Ehrig; Peter Deuffhard. *GMERR – an Error Minimizing Variant of GMRES.*

Abstract: The paper analyzes a recently proposed iterative error minimizing method for the solution of linear systems. Sufficient and necessary conditions for convergence are studied, which show that the method essentially requires normal matrices. An efficient implementation similar to GMRES has been worked out in detail. Numerical tests on general non-normal matrices, of course, indicate that this approach is not competitive with GMRES. Summarizing, if error minimizing is important, one should rather choose CGNE. A computational niche for GMERR might be problems, where normal but non-symmetric matrices occur, like dissipative quantum mechanics.

SC 97–64 Frank Schmidt. *Computation of Discrete Transparent Boundary Conditions for the 2D Helmholtz Equation*

Abstract: We present a family of nonlocal transparent boundary conditions for the 2D Helmholtz equation. The whole domain, on which the Helmholtz equation is defined, is decomposed into an interior and an exterior domain. The corresponding interior Helmholtz problem is formulated as a variational problem in standard manner, representing a boundary value problem, whereas the exterior problem is posed as an initial value problem in the radial variable. This problem is then solved approximately by means of the Laplace transformation. The derived boundary conditions are asymptotically correct, model inhomogeneous exterior domains and are simple to implement.

SC 97–65 Folkmar A. Bornemann. *Homogenization in Time II: Mechanical Systems Subject to Friction and Gyroscopic Forces.*

Abstract: In our previous work [Preprint SC 97–48] we have studied natural mechanical systems on Riemannian manifolds with a strong constraining potential.

These systems establish fast nonlinear oscillations around some equilibrium manifold. Important in applications, the problem of elimination of the fast degrees of freedom, or *homogenization in time*, leads to determine the singular limit of infinite strength of the constraining potential. In the present paper we extend this study to systems which are subject to external forces that are non-potential, depending in a mixed way on positions *and* velocities. We will argue that the method of weak convergence used in [Preprint SC 97–48] covers such forces if and only if they result from viscous friction and gyroscopic terms. All the results of [Preprint SC 97–48] directly extend if there is no friction transversal to the equilibrium manifold; otherwise we show that instructive modifications apply.

SC 97–66 Rudolf Beck; Peter Deuffhard; Ralf Hiptmair; Ronald H.W. Hoppe; Barbara Wohlmuth. *Adaptive Multilevel Methods for Edge Element Discretizations of Maxwell's Equations*.

Abstract: The focus of this paper is on the efficient solution of boundary value problems involving the double-*curl* operator. Those arise in the computation of electromagnetic fields in various settings, for instance when solving the electric or magnetic wave equation with implicit timestepping, when tackling time-harmonic problems or in the context of eddy-current computations.

Their discretization is based on Nédélec's $H(\text{curl}, \Omega)$ -conforming edge elements on unstructured grids. In order to capture local effects and to guarantee a prescribed accuracy of the approximate solution adaptive refinement of the grid controlled by a posteriori error estimators is employed. The hierarchy of meshes created through adaptive refinement forms the foundation for the fast iterative solution of the resulting linear systems by a multigrid method.

The guiding principle underlying the design of both the error estimators and the multigrid method is the separate treatment of the kernel of the *curl*-operator and its orthogonal complement. Only on the latter we have proper ellipticity of the problem. Yet, exploiting the existence of computationally available discrete potentials for edge element spaces, we can switch to an elliptic problem in potential space to deal with nullspace of *curl*. Thus both cases become amenable to strategies of error estimation and multigrid solution developed for second order elliptic problems.

The efficacy of the approach is confirmed by numerical experiments which cover several model problems and an application to waveguide simulation.

SC 97–67 Alexander Fischer; Frank Cordes; Christof Schütte. *Hybrid Monte Carlo with Adaptive Temperature in a Mixed-Canonical Ensemble: Efficient Conformational Analysis of RNA*.

Abstract: A hybrid Monte Carlo method with adaptive temperature choice is presented, which exactly generates the distribution of a mixed-canonical ensemble composed of two canonical ensembles at low and high temperature. The analysis of resulting Markov chains with the reweighting technique shows an efficient sampling of the canonical distribution at low temperature, whereas the

high temperature component facilitates conformational transitions, which allows shorter simulation times.

The algorithm was tested by comparing analytical and numerical results for the small n-butane molecule before simulations were performed for a triribonucleotide. Sampling the complex multi-minima energy landscape of these small RNA segments, we observed enforced crossing of energy barriers.

SC 97–68 Ulrich Nowak; Susanna Gebauer. *A New Test Frame for Ordinary Differential Equation Solvers.*

Abstract: Benchmarking of ODE methods has a long tradition. Several sets of test problems have been developed and new problems are still collected. So, a whole variety of problems can be used to check the efficiency of a method under investigation. In general, efficiency is measured by the amount of work which is necessary to get a reliable solution for a prescribed accuracy. In order to quantify the term “amount of work” usually not only the computing time is measured but also the number of calls of functional units. To quantify the term “quality of a numerical solution” usually the l_2 -norm of the true error at the final point of the integration interval is used. In our contribution we first discuss some general aspects of benchmarking. Then we present a new test frame which allows to solve typical benchmark problems with some of the state of the art integrators within a unified framework. Finally we show some results of our benchmark tests. Part of the test frame can be used interactively in the World Wide Web.

SC 97–69 Ulrich Nowak; Rainald Ehrig; Lars Oeverdieck. *Parallel Extrapolation Methods and Their Application in Chemical Engineering.*

Abstract: We study the parallelization of linearly-implicit extrapolation methods for the solution of large scale systems of differential algebraic equations arising in a method of lines (MOL) treatment of partial differential equations. In our approach we combine a slightly overlapping domain decomposition together with a polynomial block Neumann preconditioner. Through the explicit computation of the matrix products of the preconditioner and the system matrix a significant gain in overall efficiency is achieved for medium-sized problems. The parallel algorithm exhibits a good scalability up to 32 processors on a Cray T3E. Preliminary results for computations on a workstation cluster are reported.

SC 97–70 Norbert Ascheuer; Michael Jünger; Gerhard Reinelt. *A Branch & Cut Algorithm for the Asymmetric Hamiltonian Path Problem with Precedence Constraints.*

Abstract: In this paper we consider a variant of the classical asymmetric travelling salesman problem, namely the asymmetric Hamiltonian path problem with precedence constraints. In this problem precedences among the nodes are present, stating that a certain node has to precede others in any feasible sequence. This problem occurs as a basic model in scheduling and routing and has a wide range of applications varying from helicopter routing, sequencing in flexible manufacturing, to stacker crane routing in an automatic storage system.

We give an integer programming model and summarize known classes of valid inequalities. We describe in detail the implementation of a branch&cut-algorithm and give computational results on real world instances and benchmark problems from TSPLIB. The results we achieve indicate that our implementation outperforms other implementations found in the literature. Real world instances with more than 200 nodes could be solved to optimality within a few minutes of CPU-time.

As a side product we obtained a branch&cut-algorithm for the ATSP. All instances in TSPLIB could be solved to optimality in a reasonable amount of computing time.

SC 97–71 Mama Foupouagnigni; André Ronveaux; Mahouton Norbert Hounkonnou. *The Fourth-Order Difference Equation Satisfied by the Associated Orthogonal Polynomials of the Δ -Laguerre-Hahn Class.*

Abstract: Starting from the D_ω -Riccati Difference equation satisfied by the Stieltjes function of a linear functional, we work out an algorithm which enables us to write the unique fourth-order difference equation satisfied by the associated of any integer order of orthogonal polynomials of the Δ -Laguerre-Hahn class. Moreover, in classical situations (Meixner, Charlier, Kravtchouk and Hahn), we give explicitly these difference equations; and from Hahn difference equation, we recover by limit process the difference equations satisfied by the associated of classical discrete orthogonal polynomials and differential equations satisfied by the associated of classical continuous orthogonal polynomials.

SC 97–72 Mama Foupouagnigni; Wolfram Koepf; André Ronveaux. *Fourth Order Difference Equation for the Associated Classical Discrete Orthogonal Polynomials.*

Abstract: We derive the fourth order difference equation satisfied by the associated of order r of the classical orthogonal polynomials of a discrete variable. The coefficients of this equation are given in terms of the polynomials σ and τ which appear in the discrete Pearson equation $\Delta(\sigma \rho) = \tau \rho$ defining the weight $\rho(x)$ of the classical discrete orthogonal polynomials.

SC 97–73 Jens Lang; Bodo Erdmann; Martin Seebaß. *Impact of Nonlinear Heat Transfer on Temperature Control in Regional Hyperthermia.*

Abstract: We describe an optimization process specially designed for regional hyperthermia of deep seated tumors in order to achieve desired steady-state temperature distributions. A nonlinear three-dimensional heat transfer model based on temperature-dependent blood perfusion is applied to predict the temperature. Using linearly implicit methods in time and adaptive multilevel finite elements in space, we are able to integrate efficiently the nonlinear heat equation with high accuracy. Optimal heating is obtained by minimizing an integral object function which measures the distance between desired and model predicted temperatures. A sequence of minima is calculated from successively improved constant-rate perfusion models employing a damped Newton method in an inner iteration. We

compare temperature distributions calculated on coarse and fine spatial grids and present numerical results for optimizations with a Sigma 60 applicator based on two individual patient models.

SC 97–74 Hans-Christian Hege; Detlev Stalling. *Fast LIC with Higher Order Filter Kernels.*

Abstract: Line integral convolution (LIC) has become a well-known and popular method for visualizing vector fields. The method works by convolving a random input texture along the integral curves of the vector field. In order to accelerate image synthesis significantly, an efficient algorithm has been proposed that utilizes pixel coherence in field line direction. This algorithm, called “fast LIC”, originally was restricted to simple box-type filter kernels.

Here we describe a generalization of fast LIC for piecewise polynomial filter kernels. Expanding the filter kernels in terms of truncated power functions allows us to exploit a certain convolution theorem. The convolution integral is expressed as a linear combination of repeated integrals (or repeated sums in the discrete case). Compared to the original algorithm the additional expense for using higher order filter kernels, e.g. of B-spline type, is very low. Such filter kernels produce smoother, less noisier results than a box filter. This is evident from visual investigation, as well as from analysis of pixel correlations. Thus, our method represents a useful extension of the fast LIC algorithm for the creation of high-quality LIC images.

5.2 Technical Reports

TR 97–01 Tilmann Friese. *MATLAB–Programme zur Lösung von Eigenwertproblemen mit einem adaptiven, nichtlinearen Mehrgitter–Verfahren.*

Zusammenfassung: Der Report beschreibt ein MATLAB–Programmpaket zur Bestimmung von Eigenlösungen der skalaren, komplexen Helmholtzgleichung auf einem zweidimensionalen Gebiet. Die Programme ermöglichen die Berechnung der q Eigenwerte mit kleinstem Realteil und der korrespondierenden Eigenfunktionen über adaptiv verfeinerten Gittern sowie die grafische Darstellung der Lösungen. Die bei der Diskretisierung entstehenden algebraischen Eigenwertprobleme werden mit einem nichtlinearen Mehrgitter–Verfahren gelöst.

TR 97–02 Jörg Heroth. *Are Sparse Grids Suitable for the Tabulation of Reduced Chemical Systems ?*

Abstract: Reduced chemical systems are used in the numerical simulation of combustion processes. An automatic approach to generate a reduced model is the so-called intrinsic-low-dimensional manifold (ILDM) by MAAS AND POPE. Thereby, the system state is tabulated as a function of some parameters. The paper analyses the storage requirements for usual interpolation schemes and for sparse grids. It also estimates the response time and gives a short description of an

implementation.

TR 97-03 Peter Deuffhard; Sebastian Reich (eds.). *2nd International Symposium Algorithms for Macromolecular Modelling*.

Abstract: The report contains the program and the collected abstracts of the 2nd International Symposium “Algorithms for Macromolecular Modelling”.

TR 97-04 Harald Böing; Wolfram Koepf. *REDUCE Package for the Indefinite and Definite Summation of q -hypergeometric Terms*.

Abstract: This package is an implementation of the q -analogues of Gosper’s and Zeilberger’s algorithm for indefinite, and definite summation of q -hypergeometric terms, respectively.

An expression a_k is called a q -hypergeometric term, if a_k/a_{k-1} is a rational function with respect to q^k . Most q -terms are based on the q -shifted factorial or q -pochhammer. Other typical q -hypergeometric terms are ratios of products of powers, q -factorials, q -binomial coefficients, and q -shifted factorials that are integer-linear in their arguments.

TR 97-05 Peter Deuffhard; Alfred Louis; W. Schlegel; Martin Seebaß (Hrsg.). *Workshop „Scientific Computing in der Medizin“ SCMED ‘97*.

Zusammenfassung: Die Arbeitstagung „Scientific Computing in der Medizin“, kurz SCMED ‘97, fand vom 22.–23. September 1997 im neu errichteten Gebäude des Konrad-Zuse-Zentrums auf dem Dahlemer naturwissenschaftlichen Campus der Freien Universität Berlin statt.

TR 97-06 Hans-Christian Hege; Konrad Polthier (eds.). *Visualization and Mathematics ‘97 - Collected Abstracts*.

Abstract: This report contains paper abstracts of the workshop “Visualization and Mathematics” held in Berlin-Dahlem in September 1997. The meeting serves as a forum for an international community of researchers and practitioners on the application of visualization techniques in mathematics and on mathematical concepts in visualization. It is the second symposium in a series of workshops bringing together mathematicians and experts from scientific visualization.

The themes of the workshop include:

- applications in differential geometry and partial differential equations
- algorithmic aspects of adaptive and hierarchical techniques in space and time
- time control of animated objects and corresponding algorithms
- algorithmic representation of objects for display, storage and exchange
- new visualization techniques for mathematical structures
- integration of visualization with symbolic and numerical computation.

TR 97-07 Sandra Schulz; Hubert Busch (Hrsg.). *Schlußbericht des Berliner Regionalen Testbed (BRTB) Projektes*.

Zusammenfassung: Im März 1993 wurde das Projekt "Regionales Testbed – RTB" in den DFN-Mitteilungen bundesweit mit folgenden Zielen ausgeschrieben und festgelegt: Einführung bzw. Pilotnutzung fortgeschrittener Netztechniken, Entwicklung von Anwendungsumgebungen mit Bedarf für hohe Übertragungsraten und Einsatz von Anwendungsumgebungen durch nachgewiesene Anwendergruppen. Die Ziele sollten durch die Vernetzung einer beschränkten Anzahl von Institutionen (Universitäten, Fachhochschulen und Forschungseinrichtungen) der jeweiligen Region, die sowieso schon einen hohen Kommunikationsbedarf untereinander hatten, erreicht werden. Die Berliner Universitäten, das HMI, das ISST und das LIT führten unter Federführung des ZIB für die Region Berlin ein regionales Testbed durch; dessen Projektlaufzeit lag im wesentlichen zwischen dem 1. Oktober 1994 und dem 30. September 1996. An diesem BRTB waren fünf Anwendungen beteiligt:

- Einheitliche Datenumgebung auf heterogenen Rechnersystemen
- Ein Hotline und Consulting System
- Medizinische Bildverarbeitung
- Hypermedia-Lehreinheiten in der Studentenausbildung
- Visualisierung wissenschaftlicher Daten

Das wesentliche Ziel, der Aufbau von finanzierbaren regionalen Breitbandnetzen als Voraussetzung für ein deutschland-weites Breitband-Wissenschaftsnetz, ist erreicht worden.

Wir danken dem DFN-Verein und dem BMBF für die Förderung dieses Projektes und allen, die zu seinem Gelingen beigetragen haben.

TR 97–08 Wolfgang Baumann; Hubert Busch; Jürgen Gottschewski; Thomas Steinke; Hinnerk Stüben. *Berliner Landeshöchstleistungsrechner Parallelrechner Cray T3D/T3E: Betrieb, Nutzung, Projekte, Perspektiven für den Ausbau.*

Zusammenfassung: Seit fast drei Jahren betreibt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) Parallelrechner der höchsten Leistungsklasse im normalen Rechenzentrumsbetrieb. Bereits im Mai 1995 hat das ZIB über seine Erfahrungen mit dem damals leistungsstärksten Parallelrechner Deutschlands berichtet. Das Gesamtkonzept des ZIB sieht weiterhin einen Höchstleistungsrechner als unabdingbaren Bestandteil des High Performance Scientific Computing (HPSC) im ZIB vor. Der vorliegende Bericht beschreibt die aktuelle Konfiguration, Betriebserfahrungen und die Rechnernutzung sowie typische Rechenleistungen, die für einzelne Anwendungsprogramme erzielt wurden. Beschreibungen der Forschungsgebiete mit den Forschungsgruppen, die den Rechner nutzen und die Anforderungen an den Rechnerausbau, die sich aus deren Arbeiten herleiten, beschließen den Bericht.

TR 97–09 Peter Müller; Ingmar Decker. *The Electronic Visualization Library.*

Abstract: Scientific visualization is a rapidly growing research field with a need

for information dissemination. This report describes the Electronic Visualization Library (EVlib), a digital library for scientific visualization. Main design goals of EVlib were an attractive user interface providing various kind of access mechanisms as well as an open interface to other already established information systems.

EVlib stores fulltext versions of documents where they are available. We also provide access to BibTeX entries for every stored document. All available BibTeX entries are combined in BibTeX bibliographies which are registered with the "Collection of Computer Science Bibliographies" at University of Karlsruhe.

Additionally, we have defined a mapping from BibTeX attributes to the Dublin Core attribute set. This mapping is used to provide a gatherer interface for the Harvest information system. This way, existing Harvest installations can immediately use EVlib as an information resource.

TR 97-10 Joachim Lügger. *Wo ist der Opac der virtuellen Bibliothek? – Strukturen des Kooperativen Bibliotheksverbundes.*

Zusammenfassung: Als neue Herausforderung für die Bibliotheken stellen sich heute die vielfältigen Publikationsmöglichkeiten, die den Wissenschaften durch das Internet zur Verfügung stehen. Die neuen Arten der wissenschaftlichen Information zu erschließen, wird für die Bibliotheken zu den neuen Aufgaben gehören.

Der Artikel diskutiert zunächst die Frage, inwieweit dabei die traditionell hohen Maßstäbe bei der bibliographischen Beschreibung und sachlichen Erschließung noch aufrechterhalten werden können. Der Autor plädiert in diesem Zusammenhang für ein reduziertes Erfassungsschema im Sinne des Dublin Core, da dieses gleichzeitig eine Arbeitsteilung zwischen Wissenschaftlern, die zu ihren eigenen Arbeiten Metadaten erstellen, und Bibliotheksmitarbeitern, die solche einfachen Beschreibungen nach professionellen Maßstäben weiterentwickeln, ermöglicht.

Der zweite Teil der Arbeit stellt eine technische Interpretation des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) vor, den eine Expertengruppe als neue Informationsstruktur für diese Region vorgesehen hat. Das Modell des Kooperativen Bibliotheksverbundes sieht im Prinzip eine dezentrale Datenhaltung vor, bei der die Bibliotheken in lokale Bibliothekssysteme katalogisieren. Im Gegensatz zu traditionellen Verbänden verzichtet der KOBV auf einen Zentralkatalog. Die in den lokalen Systemen vorliegende Information hingegen wird den Nutzern über eine Suchmaschine erschlossen und zur Verfügung gestellt. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Zielsysteme über offene Schnittstellen (Z39.50 und WWW) angesprochen werden können. Zur Optimierung der bibliothekarischen Arbeit im Sinne von *Copy Cataloging* und *Copy Acquisition* steht vor allem den KOBV-Partnern ein zentrales Fremddatenangebot sowie die in Deutschland verbreiteten Normdaten zur Verfügung. Mit der Kommunikation über das standardisierte Protokoll Z39.50 sind dabei sowohl der KOBV selbst

als auch das Fremddatenangebot virtuell skalierbar.

Im Unterschied zu einem zentralistisch organisierten Bibliotheksverbund eröffnet der auf dezentralen Strukturen aufbauende Kooperative Bibliotheksverbunds auch die Möglichkeit, virtuelle Fachverbände zu beispielsweise einer Disziplin zu bilden.

- TR 97–11** Monika Kuberek, Stefan Lohrum. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Schnittstelle Lokalsysteme-Suchmaschine, Spezifikation der Anforderungen.*

Zusammenfassung: Die Kommunikation zwischen der Suchmaschine und den Lokalsystemen findet über eine offene Schnittstelle statt. Als Standardschnittstelle dient Z39.50-1995 (auch als Z39.50, Level 3 bekannt). Grundsätzlich können auch Lokalsysteme angesprochen werden, die nur über eine WWW-Schnittstelle verfügen. Dieses Papier spezifiziert die Anforderungen, die seitens der KOBV-Suchmaschine an ein Lokalsystem gestellt werden.

- TR 97–12** Monika Kuberek. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Normdaten im KOBV.*

Zusammenfassung: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wird sich aktiv am Aufbau der deutschen Normdateien Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Schlagwortnormdatei (SWD) und Personennamendatei (PND) beteiligen, die in Gemeinschaftsarbeit der deutschen Bibliotheksverbände erstellt werden. Nach der Konzeption liegen die Normdateien auf dem zentralen KOBV-Server auf und stehen über die Suchmaschine allen angeschlossenen Bibliotheken zur Verfügung. Lokal befinden sich nur die Normdatensätze, die mit Titeln verknüpft sind. Das Update der Normdaten geschieht zentral.

Es werden Lösungen aufgezeigt, wie die Normdaten von den KOBV-Bibliotheken mittels offener Schnittstellen (Z39.50) genutzt und erstellt werden können und auf welche Weise der KOBV mit den Redaktionen der Normdateien zusammenarbeiten kann. Neben den technischen werden auch die organisatorischen Fragen erörtert, die mit dem neuartigen KOBV-Konzept der dezentralen Nutzung der Normdaten in den lokalen Bibliothekssystemen zusammenhängen. Weitere Themen sind die regionale Zusammenarbeit der Bibliotheken und der KOBV-Zentrale mit der Zeitschriftendatenbank (ZDB) sowie die Einbindung zusätzlicher Normdaten, wie Universal- bzw. Fachklassifikationen und Thesauri.

- TR 97–13** Josef Willenborg. *Die Suchmaschine des KOBV – Spezifikation der Anforderungen.*

Zusammenfassung: Das vorliegende Papier spezifiziert die Anforderungen an die Suchmaschine im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV). Die Suchmaschine realisiert einen virtuellen Union Catalog, der auch als virtueller OPAC im Netz ansprechbar ist. Die zentrale Suchmaschine fungiert als Gateway zwischen der WWW- und der Z39.50-Welt des Internet. Mit Hilfe der Suchmaschine wird der Zugriff auf die Bibliotheken des KOBV, auf

Normdaten und Fremddaten sowie auf weitere Informationsanbieter außerhalb des KOBV (über Internet und andere Netze) ermöglicht. Auf die Suchmaschine greifen sowohl Bibliotheksmitarbeiter/innen als auch Endnutzer zu, d.h. sie muß unterschiedlichen Anwenderbedürfnissen gerecht werden.

TR 97-14 Joachim Lügger. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg - Lokale Konzepte und technische Schnittstellen.*

Zusammenfassung: Dieser Artikel faßt die Ergebnisse einer Arbeitsgruppe bestehend aus Bibliothekaren und Informatikern der Universitäts- und Hochschulbibliotheken aus Berlin und Brandenburg zusammen, welche sich im Frühjahr 1997 zusammengefunden hatte, um die Anforderungen an den Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) aus Sicht der betroffenen Institutionen zu diskutieren. Dieser Verbund verzichtet zugunsten einer verteilten Datenhaltung in den jeweiligen lokalen Bibliothekssystemen auf einen Zentralkatalog und realisiert statt dessen mittels einer Suchmaschine einen virtuellen Union-Katalog, der auch als OPAC im Internet zur Verfügung steht. Zusätzlich soll zur Unterstützung der Erwerbungs- und Katalogisierungsarbeit der wissenschaftlichen Bibliotheken ein Fremd- und Normdatenserver errichtet werden.

Beschrieben werden neben den erforderlichen Internet-Schnittstellen (WWW, Z39.50), das Fremd- und Normdatenangebot als auch konkrete Anforderungen an die Suchmaschine. Dabei wird die Sicht der Bibliotheksmitarbeiter ebenso wie die der Bibliotheksbenutzer berücksichtigt.

TR 97-15 Beate Rusch. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – Strategien zur Nutzung von Fremddaten.*

Zusammenfassung: Ausgehend von einer Analyse der Fremddatenbedarfs in der Bibliotheksregion Berlin-Brandenburg wird überlegt, welche Fremddaten im neuen Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) in Zukunft an welchem Ort vorliegen sollten. Dabei wird konzeptionell eine Balance versucht zwischen den Daten, die zentral für die Region angeboten werden, den Daten, die die Bibliotheken (langfristig) über Z39.50 aus (verbund-) fremden Bibliotheken abrufen, und denjenigen Datenbeständen, die ausschließlich zur lokalen Nutzung vorliegen.

TR 97-16 Carlos Saro; Beate Schröder; Katrin Volkmann. *GOS Benutzer-Handbuch. Anleitung zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern.*

Zusammenfassung: Das Handbuch enthält eine ausführliche Einführung in das am ZIB für den Einsatz in der Museumsdokumentation entwickelte Datenbanksystem GOS.

TR 97-17 Hans-H. Clemens; Carlos Saro. *Abschlußbericht für das Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern.*

Zusammenfassung: Von Januar 1995 bis Februar 1997 wurde am ZIB ein von der Robert Bosch Stiftung gefördertes Projekt zum Sammlungsmanagement für

kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern durchgeführt. In dem vorliegenden Abschlußbericht werden die Ziele, die Strategie, die Durchführung und die Ergebnisse des Projekts beschrieben.

TR 97–18 Hans-H. Clemens. *Systemanalyse und Datenkatalog zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*.
Zusammenfassung: Von Januar 1995 bis Februar 1997 wurde am ZIB ein von der Robert Bosch Stiftung gefördertes Projekt zum Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern durchgeführt. Die vorliegende Systemanalyse beschreibt exemplarisch die Voraussetzungen und die notwendigen Arbeitsschritte für den Aufbau einer Dokumentation in einem Museum. Ein im Anhang wiedergegebener Datenfeldkatalog hilft beim „sanften“ Übergang von einer papiergestützten zu einer computergestützten Dokumentation.

TR 97–19 Christof Wolters. *GOS Thesaurus–Handbuch zum Projekt: Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern*.
Zusammenfassung: Das GOS Thesaurus–Handbuch wurde für die Teilnehmer des von der Robert Bosch Stiftung geförderten Projekts zum Sammlungsmanagement für kulturgeschichtliche Museen in den neuen Bundesländern geschrieben. Es basiert auf verschiedenen vom Institut für Museumskunde gemeinsam mit dem ZIB durchgeführten Projekten und beschreibt mit zahlreichen Beispielen Struktur und Aufbau eines Thesaurus.

5.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

Peter Deuffhard

- Annals of Numerical Mathematics, J.C. Baltzer, Basel/Schweiz
- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Beijing
- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Pergamon Press, Oxford, New York, Seoul, Tokyo
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer International

Martin Grötschel

- Computing
- Discrete and Computational Geometry
- Computational and Applied Mathematics
- Mathematical Programming A

- Mathematics of Operations Research
- SIAM Journal on Discrete Mathematics
- Surveys of Mathematics for Industry
- Zeitschrift für Operations Research

Wolfram Koepf

- Newsletter der SIAM Activity Group on Orthogonal Polynomials and Special Functions

Robert Weismantel

- Management Science
- Optima (Book review editor)

5.4 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. K. Aardal und R. Weismantel, *Polyhedral Combinatorics*, in *Annotated Bibliographies in Combinatorial Optimization*, M. Dell'Amico, F. Maffioli and S. Martello (eds.), Wiley, 1997, 31–44.
2. D. Alevras, M. Grötschel, R. Wessäly, *Capacity and Survivability Models for Telecommunication Networks*. Proceedings der EURO XV/INFORMS XXXIV Meeting, Barcelona, Spanien, 1997.
3. H. Battke, D. Stalling, and H.-C. Hege, *Fast line integral convolution for arbitrary surfaces in 3D*, Visualization and Mathematics (Hans-Christian Hege and Konrad Polthier, eds.), Springer-Verlag, Heidelberg, 1997, pp. 181–195.
4. R. Beck, P. Deuffhard, H.-C. Hege, M. Seebaß, and D. Stalling, *Numerical algorithms and visualization in medical treatment planning*, Visualization and Mathematics (Hans-Christian Hege and Konrad Polthier, eds.), Springer-Verlag, Heidelberg, 1997, pp. 303–328.
5. R. Beck, B. Erdmann, and R. Roitzsch: An Object-Oriented Adaptive Finite Element Code and its Application in Hyperthermia Treatment Planning. In: *Modern Software Tools for Scientific Computing*, Erlend Arge, Are Magnus Bruaset, and Hans Petter Langtangen (eds.), Birkhäuser, 1997.
6. U. Betke, M. Henk und L. Tsintsifa, *Inradii of simplices*, Discrete Comput. Geom., **17** (1997), 365–375.
7. H. G. Bock, J. P. Schlöder, M. C. Steinbach, H. Wörn, V. H. Schulz und R. W. Longman, *Schnelle Roboter am Fließband: Mathematische Bahnoptimierung in*

- der Praxis, Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft* (K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann, and H. Schunck, Hrsg.), Springer, 1997, 539–550.
8. R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier und Ch. Küttner, *Berliner Telebus bietet Mobilität für Behinderte*, *Der Nahverkehr*, **1–2** (1997), 20–22.
 9. _____, *Optimierung des Berliner Behindertenfahrdienstes*, *DMV Mitteilungen*, **2** (1997), 38–43.
 10. F. A. Bornemann and C. Schütte, *Homogenization of Hamiltonian systems with a strong constraining potential*, *Physica D*, **102** (1997), pp. 57–77.
 11. F. A. Bornemann and P. Deuffhard, *Cascadic Multigrid Methods*, in *Domain Decomposition Methods in Sciences and Engineering*, R. Glowinski, J. Périaux, Z. Shi, and O. Widlund, (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, New York, 1997, pp. 205–212.
 12. A. Brandt, M. Brandt, G. Spahl und D. Weber, *Modelling and Optimization of Call Distribution Systems*, *Teletraffic Contributions for the Information Age, Proceedings of the 15th International Teletraffic Congress – ITC 15* (Washington), Elsevier, 1997, 133–144.
 13. C.C. Carøe, A. Ruszczyński und R. Schultz, *Unit commitment under uncertainty via two-stage stochastic programming*, in: C.C. Carøe, D. Pisinger (eds.), *Proceedings NOAS'97, Technical Report DIKU-TR-97/23*, Department of Computer Science, University of Copenhagen, 1997.
 14. G. Cornuejols, R. Urbaniak, R. Weismantel und L. Wolsey, *Decomposition of integer programs and of generating sets*, *Lecture Notes in Computer Science* **1284**, *Algorithms-ESA'97*, R. Burkard and G. Woeginger (eds.), Springer, 1997, 92–103.
 15. W. Dalitz, M. Grötschel, J. Lügger, *Information Services for Mathematics in the Internet (Math-Net)*. In A. Sydow (Hrsg.), *15th IMACS World Congress and Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics*, Vol. 4: *Artificial Intelligence and Computer Science*, Wissenschaft und Technik Verlag, Berlin, 1997, 773–778
 16. P. Deuffhard, J. Heroth, U. Maas, *Dynamic Dimension Reduction in Chemical Models*, in: J. Warnatz, F. Behrendt (eds.), *Proc. Int. Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems*, 24.–26.07.96, Heidelberg, CD-Version (1997).
 17. P. Deuffhard, M. Weiser, *Local Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic Problems*, in: M-O. Bristeau, G. Etgen, W. Fitzgibbon, J-L. Lions, J. Périaux, M. Wheeler (eds.), *Computational Science for the 21st Century*, Wiley–Interscience–Europe, pp.129-138 (1997).
 18. P. Deuffhard, M. Seebaß, D. Stalling, R. Beck, and H.-C. Hege, *Hyperthermia treatment planning in clinical cancer therapy: Modelling, simulation and visualization*, *Computational Physics, Chemistry and Biology* (Proceedings of the 15th

- IMACS World Congress 1997 on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics) (Achim Sydow, ed.), vol. 3, Wissenschaft und Technik Verlag, 1997, pp. 9–17.
19. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Seeking the Equation of State of Non-Compact Lattice QED*, Nucl. Phys. B487 (1997), 313–341.
 20. M. Grötschel, A. Martin, R. Weismantel, *The Steiner Tree Packing Problem in VLSI-Design*. Mathematical Programming **78** (1997), 265–281.
 21. M. Grötschel, *Der Weg der Mathematik in die Informationsgesellschaft, Teil I*. DMV-Mitteilungen, 3/1997, 48–57.
 22. M. Grötschel, *Der Weg der Mathematik in die Informationsgesellschaft, Teil II*. DMV-Mitteilungen, 4/1997, 43–48.
 23. M. Grötschel, A. Löbel und M. Völker, *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im Öffentlichen Nahverkehr*. In K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann und H. Schunck (Hrsg.), *MATHEMATIK – Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, Springer Verlag, 1997, 609–624
 24. H.-C. Hege and D. Stalling, *LIC: Acceleration, animation, zoom*, Texture Synthesis with Line Integral Convolution, Course Notes 8, ACM Siggraph, August 1997, pp. 17–49.
 25. Ch. Helmberg, *Fixing variables in semidefinite relaxations*, Lecture Notes in Computer Science **1284**, Algorithms-ESA'97, R. Burkard and G. Woeginger eds., Springer, 1997, 259–270.
 26. M. Henk, *Note on shortest und nearest lattice vectors*, Inform. Process. Lett., **61** (1997), 183–188.
 27. M. Henk, J. Richter-Gebert und G. M. Ziegler, *Basic properties of convex polytopes*, CRC Handbook of Discrete und Computational Geometry, J.E. Goodman und J. O'Rourke eds., CRC Press, Boca Raton, Florida, 1997.
 28. M. Henk und R. Weismantel, *On Hilbert bases of polyhedral cones*, Results in Mathematics, **32**, (1997), 298–303.
 29. ———, *Test sets of the knapsack problem and simultaneous diophantine approximation*, Lecture Notes in Computer Science **1284**, Algorithms-ESA'97, R. Burkard und G. Woeginger (eds.), Springer, 1997, 271–283.
 30. S. Hougardy, V.B. Le und A. Wagler, *Wing-Triangulated Graphs are Perfect*, Journal of Graph Theory **24**, No. 1 (1997), 25–31.
 31. W. Koepf, *Numeric versus symbolic computation*. Teaching Mathematics with DERIVE and the TI-92. Tagungsband der Tagung Computeralgebra in MathEducation, International DERIVE and TI-92 Conference, Schloß Birlinghoven, 2.–6. Juli 1996. Herausgegeben von Bärbel Barzel, Zentrale Koordination Lehrerbildung, ZKL-Texte 2, Münster, 1996, 262–282 (1996, erschienen 1997).

32. W. Koepf, *Graphische Darstellungen im Analysisunterricht*. Praxis der Mathematik 39 (1), 31–37 (1997).
33. W. Koepf, *Identities for families of orthogonal polynomials and special functions*. Integral Transforms and Special Functions 5, 69–102 (1997).
34. W. Koepf, *The algebra of holonomic equations*. Mathematische Semesterberichte 44, 173–194 (1997).
35. W. Koepf, *Gröbner bases and triangles*. International Journal of Computer Algebra in Mathematics Education 4, 371–386 (1997).
36. W. Koepf, D. Schmersau, *Weinstein's functions and the Askey-Gasper identity*. Integral Transforms and Special Functions 5, 227–246 (1997).
37. J. Lang, B. Erdmann, R. Roitzsch: *Three-Dimensional Fully Adaptive Solution of Thermo-Diffusive Flame Propagation Problems*. In: R.W. Lewis, J.T. Cross (eds.), Numerical Methods in Thermal Problems. 857-862, (Pineridge Press, Swansea, UK, 1997)
38. J. Lang, B. Erdmann, R. Roitzsch: *Adaptive Time-Space Discretization for Combustion Problems*. In: A. Sydow (editor), 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Vol. 2 , Numerical Mathematics. 149–155, (Wissenschaft und Technik Verlag, Berlin, 1997)
39. R. W. Longman, Ju Li, M. C. Steinbach und H. G. Bock, *Issues in the implementation of time-optimal robot path planning*, A Collection of the 1997 Nonlinear Dynamical Systems Technical Papers Presented at the 35th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, NV, Jan. 1997, AIAA publication number CP972, 1997, 517–527, eingereicht bei J. Guidance.
40. J. Nadobny, P. Wust, D. Stalling, H.-C. Hege, P. Deuffhard, and R. Felix, *A quantitative comparison between VSIE and the FDTD method using electrically equivalent patient and antenna models*, Proceedings of 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, April 2-5, 1997, p. 145.
41. M. Pfeiffer, K. Lenz, A. Lau, T. Elsässer, T. Steinke, *Analysis of the Vibrational Spectra of Heterocyclic Aromatic Molecules Showing Internal Proton and Deuterium Transfer*, J. of Raman Spectroscopy 28 (1997), 61–72.
42. J. Rambau, *A suspension lemma for bounded posets*, Journal of Combinatorial Theory, Series A **28** (1997), 374–379.
43. ———, *Triangulations of cyclic polytopes and higher Bruhat orders*, Mathematika **44** (1997), 162–194.
44. S. Reich, *On higher-order semi-explicit symplectic partitioned Runge-Kutta methods for constrained Hamiltonian systems*, Numer. Math. **76**, pp. 231–247 (1997)

45. S. Reich, *Transmission line equations as Hamiltonian partial differential equations: theory and implications for circuit simulations*, in: Kleinheubacher Berichte, Vol **40**, pp. 304–312 (1997)
46. W. Römisch, R. Schultz, D. Dentcheva, R. Gollmer, A. Möller, P. Reeh, G. Schwarzbach und J. Thomas, *Optimale Blockauswahl bei der Kraftwerkseinsatzplanung*, in: K.-H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann, H. Schunck (Hrsg.), “Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft, Verbundprojekte zwischen Universität und Industrie”, Springer, 1997, 567–577.
47. F. Schmidt and D. Yevick. Discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations. *J. Comput. Phys.*, 134: 96–107, 1997.
48. F. Schmidt. Discrete transparent boundary conditions for the Fresnel equation. In *Proceedings of the 8th European Conference on Integrated Optics*, pages 222–225, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2-4 April 1977.
49. Ch. Schütte and F.A. Bornemann, *Homogenization Approach to Smoothed Molecular Dynamics*, in: Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applications **30**, pp. 1805–1814 (1997).
50. M. Seebaß, D. Stalling, M. Zöckler, H.-C. Hege, P. Wust, R. Felix, and P. Deuffhard, *Surface mesh generation for numerical simulations of hyperthermia treatments*, Proceedings of 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, April 2-5, 1997, p. 146.
51. D. Stalling, *LIC on surfaces*, Texture Synthesis with Line Integral Convolution, Course Notes 8, ACM Siggraph, August 1997, pp. 51–64.
52. D. Stalling, M. Zöckler, and H.-C. Hege, *Fast display of illuminated field lines*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics **3** (1997), no. 2, 118–128.
53. R. Thomas und R. Weismantel, *Truncated Gröbner bases for integer programming*, Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing, Vol. 8, No. **4** (1997), 241–257.
54. R. Urbaniak, R. Weismantel und G.M. Ziegler, *A variant of the Buchberger algorithm for integer programming*, SIAM Journal on Discrete Mathematics, Vol. 1, No. **10** (1997), 96–108.
55. S. Wegner, D. Stalling, H.-C. Hege, H. Oswald, and E. Fleck, *Die 3D-Wasserscheidentransformation auf Graphenebene – eine Anwendung für die Hyperthermieplanung*, Tagungsband zum 5. Freiburger Workshop ‘Digitale Bildverarbeitung in der Medizin’ (T. Tolxdorff B. Arnolds, H. Müller, D. Saupe, eds.), März 1997, pp. 31–36.
56. R. Weismantel, *On the 0/1 Knapsack polytope*, Mathematical Programming **77** (1997), 49–68.

57. W. Włodarczyk, P. Wust, H. Föhling, J. Nadobny, G. Auer, G. Mönich, and R. Felix, *Short antennas as radiation elements for segmented phased-array hyperthermia system*, Proceedings of 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, April 2-5, 1997, p. 81.
58. P. Wust, J. Nadobny, J. Gellerman, M. Seebaß, D. Stalling, H.-C. Hege, P. Deuffhard, V. Budach, and R. Felix, *Patient models and algorithms for hyperthermia planning*, Proceedings of 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, April 2-5, 1997, p. 75.
59. D. Yevick, J. Yu, and F. Schmidt. Analytic studies of absorbing and impedance-matched boundary layers. *IEEE Photonics Technology Letters*, 9:73–75, 1997.
60. M. Zöckler, D. Stalling, and H.-C. Hege, *Parallel line integral convolution*, *Parallel Computing* **23** (1997), no. 7, 975–989.

5.5 Monographien

Hans–Christian Hege, Konrad Polthier (Hrsg.), *Visualization and Mathematics. Experiments, Simulations and Environments*. Springer–Verlag, 1997, 386 pp. (ISBN 3-540-61269-6)

5.6 Habilitationen

Freie Universität Berlin

Folkmar A. Bornemann (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Homogenization of singularly perturbed conservative mechanical systems

Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

5.7 Dissertationen

Technische Universität Berlin

Andreas Löbel (Abt. Optimierung)

Optimal Vehicle Scheduling in Public Transit

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Roland Wunderling (Abt. Optimierung)

Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.8 Diplomarbeiten

Freie Universität Berlin

Benedikt Dietrich (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Numerische Behandlung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit iterativen Unterraummethoden

Betreuer: Peter Deuffhard und Christof Schütte (FU Berlin und ZIB)

Andreas Fischer (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Die Hybrid–Monte–Carlo–Methode in der Molekülphysik

Betreuer: Peter Deuffhard und Christof Schütte (FU Berlin und ZIB)

Thomas Holder (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Strukturerhaltende Integration Hamiltonscher Systeme unter besonderer Berücksichtigung der Dynamik starrer Körper

Betreuer: Peter Deuffhard und Sebastian Reich (FU Berlin und ZIB)

Wilhelm Huisinga (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Newton– und Krylov–Approximation zur Integration großer Differentialgleichungssysteme aus der Quantendynamik

Betreuer: Peter Deuffhard und Christof Schütte (FU Berlin und ZIB)

Andreas Walsleben (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Whitney–Elemente zur Diskretisierung der Maxwell–Gleichungen in inhomogenen Medien

Betreuer: Peter Deuffhard und Folkmar A. Bornemann (FU Berlin und ZIB)

Johannes Willkomm (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Eine adaptive Dimensionssteuerung der Ortsdiskretisierung der Schrödingergleichung

Betreuer: Peter Deuffhard und Christof Schütte (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Andreas Bley (Abt. Optimierung)

Node-Disjoint Length-Restricted Paths

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Nils Ebert (Abt. Optimierung)

Behandlung zyklischer Produktionsprozesse in der chemisch-pharmazeutischen Industrie

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Marcus Fischer (Abt. Optimierung)

Gestaffelte Brennstoffpreise in der Kraftwerkseinsatzoptimierung

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Jörg Förster (Abt. Optimierung)

Minimum Generators of an Interval System: Implementation of Frank's Algorithmic Proof of Györi's Theorem

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Michael Ganß (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

LR-Zerlegung dünnbesetzter Matrizen für Parallelrechner mit verteiltem Speicher, Februar 1997

Betreuer: Stefan Jähnichen, Peter Pepper (beide Fachbereich Informatik, TU Berlin), Roland Wunderling (ZIB)

Susanne Gleißner (Abt. Optimierung)

Optimierung einer Kommissionierungsanlage: Modellierung und Lösungsverfahren

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Doris Kolletschke (Abt. Optimierung)

Lösung zeitbeschränkter Rundreiseprobleme mit Dynamischer Programmierung

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Anja Kurth (Abt. Optimierung)

Approximationsalgorithmen für Mehrgüter-Flußprobleme

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Florian Leppin (Abt. Optimierung)

Die volumetrische Methode zur konvexen Optimierung

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Marianne Möde (Abt. Optimierung)

Kostengünstige Dimensionierung von ausfallsicheren Telekommunikationsnetzen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Robby Reinicke (Abt. Optimierung)

Implementierung der volumetrischen Methode für konvexe Optimierungsprobleme

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Thomas Schaller (Abt. Optimierung)

Online-Heuristiken für kombinatorische Optimierungsprobleme

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Karsten Schneider (Abt. Optimierung)

Frequenzzuweisung im Mobilfunk mittels lokaler Suche

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Tanja Walter (Abt. Optimierung)

Routenplanung in Ausfallsituationen zur kostengünstigen Dimensionierung von Telekommunikationsnetzen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Vincent Winczewski (Abt. Wissenschaftliche Informationssysteme)

Entwurf und Implementierung ausgewählter, zentraler Komponenten eines Informationssystems für die Mathematik in Deutschland

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Markus Wurzel (Abt. Optimierung)

Kostenminimale Rohstoffdisposition in einem pharmazeutischen Unternehmen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Malte Zöckler (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Molekulardynamische Simulation des Wachstums zirkumstellarer Silikat-Staubteilchen

Betreuer: Erwin Sedlmayr (Fachbereich Physik, TU Berlin), Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

6 Produkte

6.1 Modulare Visualisierungsumgebungen

Die in der Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung entwickelten Visualisierungsverfahren sind in einem modularen, objektorientierten Softwaresystem implementiert. Es verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche, kann aber auch per Skript gesteuert werden. Bei der Implementierung wurden moderne Programmier-techniken und Grafikstandards bzw. Defacto-Standards wie z.B. C++, Motif, OpenGL und OpenInventor verwendet. Das System besteht aus einem generischen, objektorientierten Kern, der jeweils um anwendungsspezifische Module ergänzt werden kann. Die offene Systemarchitektur erlaubt es, für viele Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren. So setzen auch die im Kapitel *Virtuelle Labors* aufgeführten Projekte Software ein, die auf diesem Kern basiert.

Für Anfang 1998 ist geplant, eine Binärversion des Kerns, ergänzt um eine Reihe von generischen Visualisierungsmodulen, im Netz frei zur Verfügung zu stellen. Damit soll dem verstärkten Interesse an dieser Software Rechnung getragen werden.

A HyperPlan

Ansprechpartner: Detlev Stalling

HyperPlan ist ein integriertes System zur Planung von Hyperthermie-Behandlungen, einer besonderen Form der Krebstherapie. Es enthält Komponenten zur Visualisierung, Modellerstellung, Simulation und Optimierung und integriert damit alle notwendigen Werkzeuge zur Erstellung von patientenspezifischen Behandlungsplänen.

Das System wird von der Firma Dr. Sennewald Medizintechnik GmbH (München) kommerziell vertrieben.

B Ginkgo

Ansprechpartner: Malte Zöckler

Ginkgo ist ein Softwarepaket zur Visualisierung und Analyse von konfokalen Mikroskopdaten aus der Biologie. Es wird im Rahmen des Projektes *Virtuelles Gehirn* entwickelt und basiert auf dem oben beschriebenen Softwarekern.

6.2 LicFactory

Verfügbar: <http://www.zib.de/Visual/projects/LicFactory/>

Ansprechpartner: Malte Zöckler

Die *LicFactory* ist ein interaktives Programm zum Erforschen der *Linien-Integral-*

Faltung. Dabei handelt es sich um eine recht junge Technik der Textursynthese, die z.B. zur Vektorfeldvisualisierung eingesetzt werden kann. Die *LicFactory* wurde für das Creative Applications Lab (CAL) der Siggraph '97 entwickelt. Sie diente als Begleitung des Kurses *Texture Synthesis with Line Integral Convolution*, und wurde zur 'most outstanding application of CAL' gewählt.

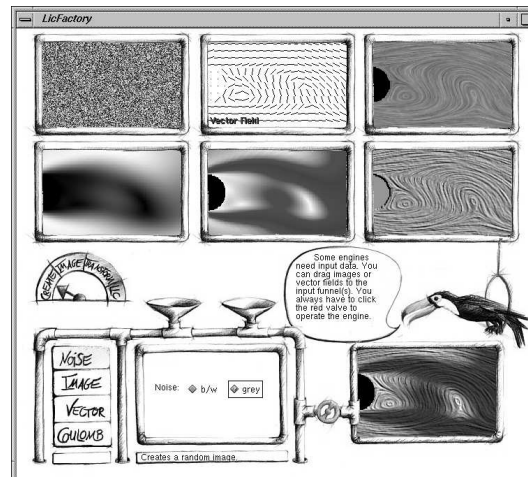


ABBILDUNG 6.1: LicFactory - ein innovatives Tool zum Erforschen der Linien-Integral-Faltung. Das unkonventionelle User-Interface wurde in Java realisiert.

6.3 SoPlex

Verfügbar: <http://www.zib.de/Optimization/Software/Soplex>

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer

SoPlex stellt eine Klassenbibliothek für einen objektorientierten Simplex-Algorithmus dar. Die Software wurde von Roland Wunderling im Rahmen seiner Doktorarbeit „Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus“ erstellt. Die Bibliothek umfaßt Klassen von drei verschiedenen Typen:

- Elementare Klassen für den allgemeinen Gebrauch, auch in Projekten außerhalb der numerischen Software und des linearen Programmierens.
- Klassen zur Linearen Algebra; sie stellen die grundlegenden Datentypen für Berechnungen mit dünnbesetzten Matrizen bereit. Ihre Funktionalität beschränkt sich auf einfache Operationen.
- Algorithmische Klassen, die zur Implementierung von Algorithmen der linearen Algebra und linearen Optimierung dienen.

6.4 DOC++

Verfügbar: <http://www.zib.de/Visual/software/doc++>

Ansprechpartner: Malte Zöckler

DOC++ ist ein Tool zur Dokumentation von C-, C++- und Java-Programmen. Es extrahiert Information aus Header-Files und wandelt diese in HTML-Text für online-Dokumentation bzw. LaTeX für qualitativ hochwertige Ausdrücke. Viele Verbesserungen sind mit der Anfang des Jahres veröffentlichten Version 3.01 verfügbar gemacht worden. DOC++ wurde von Mitarbeitern der Abteilung *Scientific Visualization* entwickelt.

6.5 Verfahren aus der Computeralgebra

A REDUCE

Ansprechpartner: Winfried Neun

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) in der Version 4.2 und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.). Im Jahre 1995 wurde die Version 3.6 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland), Queen Mary and Westfield College (London), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Software-Händler in Japan und Polen.

In der Zeit bis zur Freigabe einer neuen Version wird das System durch einen patches Mechanismus bzw. durch Vertrieb neuer Software-Module durch die Netlib aktuell gehalten.

Beiträge des ZIB zu REDUCE:

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell, S. Kameny)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner-Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H.M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
INEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
LINALG	Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebbeck)

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)
REACTEQN	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)
TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGINT	Trigonometrische Integration (N. Langmead)
TRIGSIMP	Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG	symbolische Summation (W. Koepf, G. Stöling)
ZTRANS	Z-Transformation und inverse Z-Transformation (W. Koepf, L. Temme)

Diese Pakete sind entweder Bestandteil des Systems REDUCE oder – falls sie nach der letzten Version entwickelt wurden – über anonymous FTP abrufbar.

B Mathematica

Ansprechpartner: Wolfram Koepf

SpecialFunctions

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen, symbolischer Potenzreihen, orthogonaler Polynome und holonomer spezieller Funktionen.*

C Maple

Verfügbar: <http://www.zib.de/koepf>

Ansprechpartner: Wolfram Koepf

FPS D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.* Es ist ferner Teil der share library ab Maple Version V.3.

summation	W. Koepf, G. Stölting: <i>Ein Maple Package für die symbolische Summation</i> . Es ist ferner Teil der <code>share library</code> ab Maple Version V.4.
sumtools	W. Koepf: <i>Eine Maple Library für die symbolische Summation</i> . Die Library ist Teil von Maple Version V.4.
hsum.mpl	W. Koepf: <i>Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities</i> .
qsum.mpl	H. Böing: <i>Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation</i> .

D Maple

Ansprechpartner: Karin Gatermann

Verfügbar: <http://www.zib.de/gatermann>

moregroebner	Version 2.1 (K. Gatermann) Maple V.3–Paket zur Berechnung von Gröbner–Basen von Idealen und Modulen, Hilbert-Reihen.
symmetry	Version 1.0: (K. Gatermann, F. Guyard) Maple V.3 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik.

6.6 CodeLib

Verfügbar: <ftp://ftp.zib.de/pub/elib/codelib>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet “Scientific Computing”. Die folgende Aufstellung umfaßt die Namen der bisher von der Abteilung “Numerische Softwareentwicklung” des ZIB nach Software–Gesichtspunkten bearbeiteten Produkte und ihre kurze Charakterisierung. Ein ausführlicheres Verzeichnis der CODELIB sowie Produktinformationen können vom ZIB angefordert werden.

A Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme

GBIT1	Iterative Sekanten–Methode basierend auf “Good Broyden updates” mit passender optimaler Schrittlängenbestimmung (mnemotechnisch für: <u>G</u> ood <u>B</u> royden <u>I</u> teration)
-------	--

B Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

NLEQ1	Newton–Verfahren, vollbesetzte Jacobi–Matrix, ohne Rangstrategie
NLEQ1S	Newton–Verfahren, dünnbesetzte Jacobi–Matrix, ohne Rangstrategie

NLEQ2	Newton–Verfahren, vollbesetzte Jacobi–Matrix, mit Rangstrategie
NLSCON	Gauss–Newton–Verfahren für nichtlineare Ausgleichsrechnung, evtl. mit nichtlinearen Gleichungsbeschränkungen (mnemotechnisch für: <u>N</u> onlinear <u>L</u> east <u>S</u> quares with nonlinear equality <u>C</u> ONstraints)
GIANT	Inexaktes Newton–Verfahren für sehr große Systeme, iterative Lösung der linearen Gleichungssysteme (mnemotechnisch für: <u>G</u> lobal <u>I</u> nexact <u>A</u> ffinvariant <u>N</u> ewton <u>T</u> echniques)

C Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

EULEX	Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Euler–Diskretisierung mit h –Extrapolation
DIFEX1	Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Mittelpunktsregel mit h^2 –Extrapolation
DIFEXM	Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer–Diskretisierung mit h^2 –Extrapolation
KEPLEX	Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler–Diskretisierung mit h^2 –Extrapolation
EULSIM	Steife Systeme erster Ordnung, semi–implizite Euler–Methode mit h –Extrapolation
METAN1	Steife Systeme erster Ordnung, semi–implizite Mittelpunktsregel mit h^2 –Extrapolation
LIMEX	Extrapolationsverfahren mit h –Extrapolation, linear–implizite differentiell–algebraische Systeme
LIMEXS	LIMEX–Variante für große Systeme mit dünnbesetzter Jacobimatrix
MEXX	h –Extrapolationsverfahren für differentiell–algebraische Systeme aus der Mehrkörperdynamik
LARKIN	Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

D Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

BVPSOL	Mehrzielmethode mit explizitem oder semi–implizitem Integrator und Newton–Verfahren mit “condensing” Algorithmus für 2–Punkt–Randwertprobleme (Standardprobleme)
BVPSOG	Mehrzielmethode mit explizitem oder semi–implizitem Integrator und Newton–Verfahren mit globalem linearen Löser für 2–Punkt–Randwertprobleme (Standardprobleme)
BVPLSQ	Mehrzielmethode mit explizitem Integrator DIFEX1 und Gauss–Newton–Verfahren für überbestimmte 2–Punkt–Randwertprobleme
MULCON	Mehrzielmethode mit Pfadverfolgungsmethode und “condensing” Algorithmus für parameterabhängige 2–Punkt–Randwertprobleme

E Gemischt symbolisch–numerische Verfahren

SYMCON Karin Gatermann, Andreas Hohmann: *Lösung von Gleichungssystemen mit Symmetrie mit Hilfe von Fortsetzungsmethoden.*

6.7 KASKADE-Toolbox

Verfügbar: <ftp://ftp.zib.de/pub/kaskade>

Ansprechpartner: Bodo Erdmann, Jens Lang, Rainer Roitzsch

A KASKADE Toolbox

KASKADE(C) FEM-Baukasten für adaptive Multilevel-Verfahren auf beliebigen Gebieten (2D, 3D), Programmiersprache C.
Anwendungen: stationäre, skalare, lineare elliptische Probleme (ell-kask); parabolische Gleichungslöser (Kastio).

KASKADE(C++)
FEM-Baukasten für adaptive Multilevel-Verfahren auf beliebigen Gebieten (1D, 2D, 3D), Programmiersprache C++.
Anwendungen: stationäre und transiente Wärmeleitung, nichtlineare Probleme wie Hindernisprobleme, Poröse-Medien-Gleichungen, Phasenübergänge.

Das Benutzerhandbuch¹ ist über die Webseiten des ZIB zu erreichen.

B KARDOS

Bilder² zu KARDOS-Anwendungen sind im WWW hinterlegt.

KARDOS Adaptive Lösung von 1D-Reaktions-Diffusions-Gleichungen. Zur Verfügbarkeit des 2D- und 3D-Programmes bitte Jens Lang ansprechen.

6.8 Informationsdienste des eLib-Servers

Verfügbar: <http://elib.zib.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

Auf dem vom ZIB betriebenen eLib-Server werden verschiedene Informationsdienste im World Wide Web angeboten. Der IMU-Server beinhaltet die elektronischen Ressourcen der *International Mathematical Union*. Er ist gleichzeitig Master für verschie-

¹<http://www.zib.de/SciSoft/kaskade/>

²<http://www.zib.de/lang/projects.html>

dene weltweit verteilte Mirrorserver. Der ICM'98-Server informiert über den im Jahre 1998 in Berlin stattfindenden Weltkongress der Mathematiker, den *International Congress of Mathematicians*. Eine umfangreiche Sammlung von Links (URLs) auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World* angeboten.

Der deutsche Mirror der *Netlib* erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten. Er steht inzwischen in einer parallelen Version auch nach Dublin Core Methoden erschlossen zur Verfügung.

Die Indexierung der in der Region Berlin-Brandenburg verfügbaren mathematischen WWW-Server mit Hilfe des *Harvest-Systems* eröffnet in der immer größeren Menge von elektronisch in dieser Region erreichbaren mathematischen Dokumenten einen ersten Überblick.

6.9 GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten

Ansprechpartner: Carlos Saro

Das System GOS dient zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation im Museum. GOS bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmodule an, die den komplexen Informationsstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. GOS wird vom ZIB in der Form PC-GOS (für Personal Computer) weitergegeben. Weitere Hinweise sind in Kapitel 3 zu finden.

7 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Norbert Ascheuer

04.04.97 *Simulation und Optimierung von Transportsystemen*

Workshop „Echtzeit-Optimierung bei unvollständiger Information“, ZIB

24.05.97 *Glückwunschkarten und Mathematik*

Tag der Mathematik, TU Berlin

29.08.97 *Optimization of an Automatic Storage System under Online Conditions*

16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

27.10.97 *Optimierung flexibler Fertigungssysteme*

15. Symposium des Arbeitskreises „Mathematik in Forschung und Praxis: Operations Research“, Bad Honnef

05.12.97 *Echtzeit-Optimierung automatischer Transportsysteme*

Workshop „Angewandte Diskrete Optimierung“, Hirschberg

Wolfgang Baumann

17.10.97 *Computational Fluid Dynamics (CFD) - Numerische Simulation von Strömungsvorgängen*

Besuch von Studenten der Medizinischen Informatik der Fachhochschule Heilbronn im ZIB

Rudolf Beck

04.04.97 *Electromagnetic Field Calculations by Finite Elements.*

16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology (ESHO-97), Berlin.

19.06.97 *Adaptive Multilevel-Lösung der Maxwellschen Gleichungen im Frequenzbereich.*

DMV-Workshop “Wissenschaftliches Rechnen in der Elektrotechnik”, Technische Hochschule Darmstadt.

29.07.97 *Feldberechnung in der Hyperthermieplanung.*

Universität Augsburg, Institut für Mathematik.

23.09.97 *Feldberechnung in der Hyperthermieplanung.*

Workshop “Scientific Computing in der Medizin (SCMED '97)”, Berlin

Andreas Bley

30.06.97 *Optimization in Telecommunications*

Chinesischer Wissenschaftsausschuß, ZIB

05.09.97 *Knotendisjunkte längenbeschränkte Wege in Graphen*

Studentenkonferenz Mathematik, Martin-Luther-Universität, Halle

Ralf Borndörfer

30.04.97 *Decomposing Matrices into Blocks*

ZIB-Seminar

26.05.97 *Set-Partitioning-Methoden zur Fahrzeugeinsatzplanung*

Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“, Berlin

15.07.97 *Karl der Große und die Verschiffung von Kohlköpfen*

Besuch einer Schulklasse aus Wittlich, ZIB

07.08.97 *Telebus Berlin: Vehicle Scheduling in a Dial-a-Ride System*

7th Int. Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport, MIT, Boston, MA, USA

28.08.97 *Set Partitioning Methods for Dial-a-Ride Systems*

16th International Symposium on Mathematical Programming,
Lausanne, Schweiz

Folkmar A. Bornemann

03.02.97 *Homogenization of Hamiltonian Systems with a Strong Constraining Potential*

Princeton University, USA

08.09.97 *Elimination schneller Zeitskalen: Auf dem Wege zur effizienten Simulation der Langzeitdynamik von Biomolekülen*

TU München

09.09.97 *Elimination schneller Zeitskalen: Auf dem Wege zur effizienten Simulation der Langzeitdynamik von Biomolekülen*

FU Berlin

09.10.97 *Elimination of Fast Scales: Weak Convergence Methods and Adiabaticity in Quantum Dynamics*

Workshop Multiscale II, MPI Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig

Manfred Brandt

26.09.97 *Analyse eines ACD-Systems mit Voice-Mail-Server*

Tagung der ÖMG, Salzburg, Österreich

Hubert Busch

21.03.97 *Statusbericht des ZIB im Themenbereich „Aktuelles aus den Hochleistungsrechenzentren“*

Treffen des AK Supercomputing der Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung (ZKI), HRZ TH Darmstadt

12.06.97 *Statusbericht über die Nutzung des CRAY T3E am ZIB*

Treffen des AK UNICOS, BMW AG, München

24.10.97 *Statusbericht des ZIB im Themenbereich „Aktuelles aus den Hochleistungsrechenzentren“*

Treffen des AK Supercomputing der Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung (ZKI), LRZ München

Wolfgang Dalitz

03.03.97 *Navigation und Suche in umfangreichen (Software-) Bibliotheken*

IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: “Multimedia in den Wissenschaften”, Würzburg

21.06.97 *Der Math-Net-Navigator*

2. Math-Net-Workshop, Universität Köln

30.06.97 *Electronic Information Services for Mathematicians*

Delegation from China State Information Center, ZIB-Berlin

22.09.97 *Der Zugang zu Informationen im Math-Net*

14. Österreichischer Mathematikerkongreß, ÖMG/DMV-Tagung, Universität Salzburg/ Österreich

13.10.97 *Math-Net: A Network for Mathematicians*

Workshop IuK-Kommission der wissenschaftlichen Fachgesellschaften, Universität Osnabrück

15.10.97 *Die Math-Net-Seiten im Überblick*

3. Math-Net-Workshop, Universität Osnabrück

Peter Deuffhard

09.01.97 *Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic PDE's*

Vortrag, Tagung “Mathematische Optimierung”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

02.02.97 *Computerized Treatment Planning for Hyperthermia*

Invited talk, High Care '97, International Congress on Medicine and Technology, Bochum

17.02.97 *Adaptive Multilevel Newton Methods*

Vortrag, Tagung “Adaptive Methoden für partielle Differentialgleichungen”,

Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

- 18.03.97** *Affinvarianzeigenschaften von nichtlinearen Problemen und Newton-Methoden*
Vortragsreihe, Sommerschule “Nichtlineare Gleichungssysteme”, Hamburg
- 06.04.97** *Affine Invariance Classification and Local Convergence Theorems*
Applied Mathematics Seminar, Department of Mathematics and Computer Science, Kuwait University, Kuwait
- 08.04.97** *Clinical Cancer Therapy Planning: Mathematical Modelling, Computer Simulation, and Visualization*
Faculty Colloquium, Department of Mathematics and Computer Science, Kuwait University, Kuwait
- 13.04.97** *Globalization by Adaptive Damping Strategies, Exact and Inexact Mode*
Applied Mathematics Seminar, Department of Mathematics and Computer Science, Kuwait University, Kuwait
- 15.04.97** *Adaptive Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic PDE's*
Applied Mathematics Seminar, Department of Mathematics and Computer Science, Kuwait University, Kuwait
- 24.05.97** *Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques*
Invited talk, Second International Symposium “Algorithms for Macromolecular Modelling”, Berlin
- 02.06.97** *Affine Invarianzeigenschaften nichtlinearer Probleme und adaptive Newton-algorithmen*
Fakultätskolloquium, Mathematische Fakultät, Universität Stuttgart
- 20.06.97** *Mit dem Rechner sehen*
Vortrag anlässlich des Konrad-Zuse-Ehrenkolloquiums, Berlin
- 30.07.97** *Essential Molecular Dynamics. Basic Concepts of a New Algorithm*
Vortrag, Tagung “Large Time Behavior in Dynamical Systems: Analysis and Numerics”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 26.08.97** *Hyperthermia Treatment Planning in Clinical Cancer Therapy: Modelling, Simulation and Visualization*
Keynote talk, 15th IMACS World Congress, Berlin
- 04.09.97** *A New Approach to the Computation of Essential Molecular Dynamics*
Invited talk, International NUMDIFF Seminar, Alexisbad
- 08.10.97** *Essential Molecular Dynamics: Progress in a New Algorithmic Approach*
Workshop “Multiscale II: Analysis and efficient simulation of multiscale problems”, Max-Planck-Institute for Mathematics in the Sciences, Leipzig.
- 24.10.97** *Computer gegen Krebs — Neue Therapiemöglichkeiten durch Mathematik*
Öffentlicher Vortrag, Urania, Berlin

10.11.97 *Simulation and Visualization in the Cancer Therapy Hyperthermia*
Vortrag, Tagung “Technisch–wissenschaftliches Hochleistungsrechnen”, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Andreas Eisenblätter

13.03 – 19.03.97 *Optimierung im Mobilfunk*
CeBIT 97, Hannover

29.05.97 *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*
DIMACS Workshop on Network Design and Facility Location, Princeton, USA

15.06.97 *A Comparison of Heuristics for Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*
EURO-INFORMS, Barcelona, Spanien

28.08.97 *A Frequency Assignment Problem in Cellular Phone Networks*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

25.09.97 *Frequency Assignment Algorithms for Industrial Application*
COST 259, Lissabon, Portugal

05.12.97 *Frequenzzuweisung in Mobilfunknetzen*
Workshop „Angewandte Diskrete Optimierung“, Hirschberg

Rainald Ehrig

12.09.97 *Highly Scalable Parallel Extrapolation Algorithms for Large Differential–Algebraic Problems*
Third European CRAY–SGI MPP Workshop 1997, Paris, Frankreich

16.09.97 *Massively Parallel Linearly–Implicit Extrapolation Algorithms as a Powerful Tool in Process Simulation*
ParCo97 1997, Bonn

Bodo Erdmann

19.03.97 *KASKADE – an Adaptive Multilevel Code for Partial Differential Equations*
Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Lissabon, Portugal

26.05.97 *Adaptive Solutions of Nonlinear Parabolic Equations with Application to Hyperthermia Treatment*
International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer, Çeşme, Turkey

Robert T. Firla

07.11.97 *Basis Reduction in Lattices and Integer Programming*
ZIB-Seminar

Hans-Hermann Frese

30.06.97 *Supercomputing am ZIB*
Besuch einer Delegation des China State Information Center im ZIB

16.12.97 *Fortran 90*
ZEDAT, Freie Universität Berlin

Tilman Friese

19.06.97 *Eine nichtlineare Mehrgitter-Methode zur Lösung des Eigenwertproblems in verlustbehafteten Medien.*
DMV-Workshop „Wissenschaftliches Rechnen in der Elektrotechnik“, Technische Hochschule Darmstadt

Karin Gatermann

19.03.97 *Lösung von Gleichungssystemen mit Mitteln der Computeralgebra*
Nichtlineare Gleichungssysteme, Harburger Sommerschulen

21.05.97 *Invariants and Equivariants for equivariant dynamics: Algebraic Computation*
Workshop Äquivariante Dynamik, des DFG Schwerpunktes “Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme”

05.07.97 *Gröbner bases and its applications*
International Colloquium on Applications of Mathematics in memoriam Lothar Collatz, Hamburg

16.09.97 *Orbit space reduction*
Workshop “Numerical Methods for Bifurcation Problems”, Minneapolis, USA.
Workshop 1 of the 1997-1998 Program “Emerging Applications of Dynamical Systems” of the Institute for Mathematics and Its Applications, University of Minnesota, USA

04.12.97 *Gröbner Basen, Invariantentheorie und dynamische Systeme mit Symmetrie*
Kolloquium dynamische Systeme, TU München

18.12.97 *Orbitraumreduktion, eine Analyse mit Mitteln der Computeralgebra*
Kolloquium des Instituts für Angewandte Mathematik der Universität Hamburg

Ralf Götz

- 13.06.97** *Umzug in den Neubau des ZIB – oder: wie verlagere ich zwei Crays, 200 WS, ein Rechnernetz, und der Benutzer bemerkt – fast – nichts!*
Treffen des AK UNICOS, BMW AG, München (gemeinsam mit Hubert Busch)

Ralf Gollmer

- 12.11.97** *Ein primales Verfahren für das Problem der optimalen Blockauswahl in Kraftwerkssystemen*
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin

Martin Grötschel

- 10.01.97** *Large-Scale Multicommodity Flow Problems in Public Transportation*
Tagung “Foundations of Computational Mathematics”, Rio de Janeiro, Brasilien
- 27.01.97** *Neue Wege der Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich*
Fraunhofer-Institut für Software- und Systemtechnik, Berlin
- 26.02.97** *Mathematik und Internet*
Veranstaltung: “Telekommunikation im mathematisch-naturwissenschaftlichen Unterricht”, Staatliches Institut für Lehrerfort- und Weiterbildung, Speyer
- 03.03.97** *Überblick über das Math-Net-Projekt*
IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: “Multimedia in den Wissenschaften”, Würzburg
- 04.03.97** *Die IuK-Aktivitäten der DMV: Stand und Pläne*
IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: “Multimedia in den Wissenschaften”, Würzburg
- 12.03.97** *Mathematik und Mobilfunk*
Lehrerfortbildungsveranstaltung beim Kongress “Mathematik in Industrie und Wirtschaft”, Duisburg
- 15.04.97** *Optimierung von Kommissionierabläufen*
Herlitz AG, Berlin
- 05.05.97** *Discrete Mathematics in Telecommunication*
Center for Basic Research in Computer Science, Aarhus, Dänemark
- 09.05.97** *Mathematische Probleme in der Telekommunikation*
Kolloquium des Mathematischen Instituts der Universität Bonn
- 10.05.97** *Informationsdienste für die Mathematik im Internet*
Plenarversammlung der Konferenz der Mathematischen Fachbereiche, Karlsruhe

- 12.06.97** *Vom Wandel der wissenschaftlichen Arbeit durch das Internet*
1. Arbeitsgruppen-Treffen des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV), Berlin
- 20.06.97** *Mit dem Rechner kommunizieren*
Konrad-Zuse-Ehrenkolloquium, Berlin
- 26.06.97** *Optimierung von Abläufen und Produktionsprozessen*
Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin
- 15.07.97** *Dimensioning of Survivable Telecommunication Networks*
EURO XV INFORMS XXXIV Meeting, Barcelona, Spanien
- 06.08.97** *Combinatorial Optimization Problems in Telecommunication*
Oberwolfach-Tagung "Effiziente Algorithmen", Oberwolfach
- 29.08.97** *On-line Optimization of Automated Guided Vehicles*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz
- 04.09.97** *Fahrzeugumlaufplanung und Netzwerkflüsse*
DMV-Studentenkonferenz, Halle
- 10.09.97** *Umlaufplanung*
Berliner Verkehrsbetriebe, Berlin
- 16.09.97** *Kooperation von Fachgesellschaften und Bibliotheken: das DMV-Projekt*
Symposium "Informationsinfrastrukturen im Wandel", Göttingen
- 22.09.97** *Der Weg der Mathematik in die Informationsgesellschaft und das Math-Net-Projekt*
IuK-Nachmittag während des ÖMG-Kongresses, Salzburg, Österreich
- 25.09.97** *Diskrete Mathematik und Telekommunikation*
ÖMG-Kongress, Salzburg, Österreich
- 27.10.97** *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV): Grundlagen und Planungen*
Herbstsitzung der Sektion IV des Bibliotheksverbundes, Staatsbibliothek zu Berlin
- 28.10.97** *Neue Informationswege in den Wissenschaften*
Workshop "Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg", Staatsbibliothek zu Berlin
- 29.10.97** *Mathematik und öffentlicher Nahverkehr*
Universität Heidelberg, Heidelberg
- 17.12.97** *Tutorial on Polyhedral Combinatorics*
Dagstuhl-Tagung "Algorithmic Techniques in Physics", Dagstuhl

Hans-Christian Hege**20.01.97** *New Developments in Vector Field Visualization*

Scientific Computing and Imaging (SCI) Research Group, Prof. Christopher R. Johnson, Department of Computer Science, University of Utah, Salt Lake City, USA

22.01.97 *Texture-based Methods for Vector Field Visualization*

Institute for Computer Applications in Science and Engineering (ICASE), NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia, USA

29.01.97 *3D-Visualisierung von Landschaften in der Umweltplanung*

Lausitzer Naturkundliche Akademie, Cottbus

15.07.97 *Visualisierung in Forschung und Technik*

Konrad-Zuse-Zentrum, Berlin

03.08.97 *LIC: Acceleration, Animation, Zoom*

Course on Texture Synthesis with Line Integral Convolution, Siggraph 97, 24th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Los Angeles CA, USA

23.09.97 *HyperPlan – ein medizinisches Planungssystem*

begleitet von Software-Demonstration durch Detlev Stalling; Workshop SCMED '97 – Scientific Computing in der Medizin, Berlin

21.11.97 *Medizinische Visualisierung in der Hyperthermie-Planung*

begleitet von Software-Demonstration durch Detlev Stalling; Fakultätentag Informatik, Berlin

Christoph Helmberg**27.08.97** *Fixing Variables in Semidefinite Relaxations*

16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

16.09.97 *Fixing Variables in Semidefinite Relaxations*

European Symposium on Algorithms '97, Graz, Österreich

16.10.97 *A Spectral Bundle Method for Semidefinite Programming***28.10.97** *Branch & Cut in Semidefinite Programming*

INFORMS, Dallas, USA Workshop "Computational Integer Programming", Berlin

16.12.97 *A Spectral Bundle Method for Semidefinite Programming*

Mathematical Programming Seminar at CORE, Belgien

Martin Henk**27.02.97** *Lattice points and polyhedral cones*

Mathematical institute of the Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn

04.04.97 *Testmengen, Hilbert-Basen und Rucksackprobleme*

Workshop „Algorithmische Diskrete Mathematik und Mathematische Optimierung“, FU Berlin

05.04.97 *Minimal generating systems of polyhedral cones*

Potsdamer Geometrie Tagung

26.05.97 *Integral bases of polyhedral cones*

Oberwolfach-Tagung „Diskrete Geometrie“

07.07.97 *Gitterpunkte in Kegeln: Geometrische und algebraische Anwendungen*

Kolloquium, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg

27.08.97 *On Hilbert bases of simplicial cones*

16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

17.09.97 *Test sets of the knapsack problem and simultaneous diophantine approximation*

European Symposium on Algorithms '97, Graz, Österreich

23.09.97 *On lattice-point-free convex bodies*

Tagung der ÖMG, Salzburg, Österreich

25.09.97 *Test sets and minimal solutions of linear Diophantine equations*

Tagung der ÖMG, Salzburg, Österreich

Nicola Kamin**20.02.97** *Effiziente Kommissionierung von Glückwunschkarten*

Herlitz PBS AG, Falkensee

Wolfram Koepf**18.04.97** *Computer statt Lehrer? Experimente mit einem Mathematikprogramm.*

Einstein tag. Einstein-Gymnasium, Berlin

23.05.97 *Integralrechnung im Zeitalter der Computeralgebra.*

Keynote Lecture, Computeralgebra im Mathematikunterricht, Neue Technologien im mathematisch-naturwissenschaftlichen Unterricht, Münster.

05.06.97 *Numeric versus symbolic computation.*

The First ISAAC Conference, Newark, Delaware, USA

05.06.97 *Orthogonal Polynomials and Computer Algebra.*

Plenary Lecture, The First ISAAC Conference, Newark, Delaware, USA

- 24.06.97** *Orthogonale Polynome und Computeralgebra.*
Funktionentheorie-Kolloquium, Technische Universität Berlin.
- 30.06.97** *Orthogonale Polynome und Computeralgebra.*
Fachbereichskolloquium, Universität Jena.
- 01.10.97** *Integration in the Era of Computer Algebra.*
The Third International Conference on Technology in Mathematics Teaching,
Koblenz.

Monika Kuberek

- 12.06.97** *KOBV-Normdatenverbund*
KOBV-Workshop, Berlin
- 25.07.97** *Normdaten im KOBV - Ergebnisse der Arbeitsgruppe und der Gespräche mit den Normdatenbetreibern*
KOBV-Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam
- 10.09.97** *Strukturen und Aufgaben des KOBV - aktueller Stand / Ergebnisse der Arbeitsgruppen*
Jahrestagung 1997 des Landesverbandes Brandenburg im Deutschen Bibliotheksverband, Stadt- und Landesbibliothek Potsdam
- 28.10.97** *Normdaten im KOBV - Verfahren zur Zusammenarbeit mit den Normdatenbetreibern*
Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin

Wolfgang Kühn

- 17.09.97** *Zonotope Dynamics in Numerical Quality Control*
International Workshop on Visualization and Mathematics '97, Berlin.

Jens Lang

- 09.04.97** *Stabilisierte Finite Elemente für Strömungsprobleme*
Institut für Angewandte Mathematik und Statistik, TU München
- 11.06.97** *KARDOS - ein adaptiver Löser für nichtlineare zeitabhängige partielle Differentialgleichungen*
BASF, Ludwigshafen
- 30.06.97** *Numerical Simulation of Complex Chemical Engineering Problems*
China Day at ZIB, Berlin

- 18.07.97** *Highly Effective Spatial Grids for Nonlinear Evolution Problems*
Invited talk, Minisymposium, SIAM 45th Anniversary Meeting, Stanford University, USA
- 22.07.97** *Three-Dimensional Fully Adaptive Solution of Thermo-Diffusive Flame Propagation Problems*
10th International Conference for Numerical Methods in Thermal Problems 1997, Swansea, United Kingdom
- 06.08.97** *KARDOS - ein adaptiver FE-Löser für nichtlineare Evolutionsprobleme in 1D, 2D und 3D*
FB Verfahrenstechnik, MLU Halle-Wittenberg
- 28.08.97** *Adaptive Time-Space Discretization for Combustion Problems*
15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin

Andreas Löbel

- 04.02.97** *Mathematische Fragestellungen bei der Einsatzplanung im Öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV)*
Seminar „Forum Verkehr und Logistik“, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- 13.03.97** *Ja, wo fahren sie denn?*
Tagung „Mathematik in Industrie und Wirtschaft“, Duisburg
- 30.07.97** *Wagenumlaufplanung im ÖPNV*
Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“, Berlin
- 07.08.97** *Recent Computational Developments for Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*
7th Int. Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport, MIT, Boston, MA, USA
- 28.08.97** *Optimal Vehicle Scheduling in Public Transit*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz
- 13.11.97** *Optimal Vehicle Scheduling in Public Transit*
Disputationsvortrag, TU Berlin

Stefan Lohrum

- 13.03.97** *Characterizing Bibliographic Databases by Content*
Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation, Universität Potsdam
- 12.06.97** *Aufgaben und Ziele der Arbeitsgruppe „Schnittstelle Lokalsystem-Suchmaschine“*
KOBV-Workshop, Berlin

- 22.07.97** *Provider Selection through the Broker*
Dagstuhl Workshop, Schloß Dagstuhl
- 22.07.97** *The MeDoc Communication Protocol*
Dagstuhl Workshop, Schloß Dagstuhl
- 25.07.97** *Anforderungen des KOBV an das Lokale Bibliothekssystem*
KOBV-Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam
- 21.08.97** *Schnittstelle der KOBV-Suchmaschine zu den Lokalsystemen*
SISIS-Anwendertreffen Berlin-Brandenburg, Universitätsbibliothek der Europa-Universität Frankfurt (Oder)
- 28.10.97** *Die lokalen Systeme im Zusammenspiel mit der Suchmaschine*
Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Eine Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin
- 17.12.97** *Neue Publikationsformen im Netz: Das Projekt MeDoc - ein verteilter Informationsdienst über Informatik-Literatur im Internet*
Zentrale Einrichtung für Information und Kommunikation, Universität Potsdam

Joachim Lügger

- 17.01.97** *Zur Struktur und Projektorganisation des Math-Net-Projekts*
1. Workshop des Math-Net Projekts, Berlin
- 27.01.97** *Informationsdienste für die Mathematik im Internet*
Fraunhofer Institut für Software- und Systemtechnik, Berlin
- 29.01.97** *Aufgaben und Ziele des Math-Net-Projekts*
Workshop des DFN-AK Informationssysteme im Rahmen des DFN-Symposiums 1997, Berlin
- 29.01.97** *Dublin Core und Metadaten - Eine Einführung*
Workshop des DFN-AK Informationssysteme im Rahmen des DFN-Symposiums 1997, Berlin
- 03.03.97** *Die KMathF-Seite: Ein Vorschlag zur Diskussion*
IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: "Multimedia in den Wissenschaften", Würzburg
- 03.03.97** *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: KOBV*
IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: "Multimedia in den Wissenschaften", Würzburg
- 30.05.97** *Statusbericht: KOBV*
Ständige Konferenz der Berliner Amtsleiter der Öffentlichen Bibliotheken, Berlin, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur

- 12.06.97** *Strukturen des Kooperativen Bibliotheksverbundes*
KOBV-Workshop, Berlin
- 25.07.97** *Das Projekt KOBV: ein Statusbericht*
KOBV-Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam
- 21.08.97** *Struktur und Entwicklung des KOBV: Informationstechnische und organisatorische Aspekte*
SISIS-Anwendertreffen Berlin-Brandenburg, Universitätsbibliothek der Europa-Universität Frankfurt (Oder)
- 28.08.97** *Information Services for Mathematics in the Internet (Math-Net)*
15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Berlin
- 10.09.97** *Strukturen und Aufgaben des KOBV - aktueller Stand / Ergebnisse der Arbeitsgruppen*
Jahrestagung 1997 des Landesverbandes Brandenburg im Deutschen Bibliotheksverband, Stadt- und Landesbibliothek Potsdam
- 28.10.97** *KOBV: Strukturen, Konzepte, Entscheidungen*
Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin
- 12.11.97** *Einführung in den Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg*
Universitätsbibliothek der Technischen Universität Berlin

Barbara Märschencz

- 20./21.11.97** *Das Rechnernetz des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin (ZIB)*
Tagung „Switching Networks und Intranet-Technologie“ der Alcatel SEL AG, Teupitz

Alexander Martin

- 11.03.97** *Solving Clustering Problems by Branch-and-Cut*
Northwestern University, Chicago, USA
- 18.04.97** *Routing through Virtual Paths in ATM networks*
University of Texas at Dallas, Dallas, USA
- 05.05.97** *Decomposing Matrices by Cutting Planes*
INFORMS Meeting, San Diego, USA
- 20.06.97** *Are Integer Programming Matrices Decomposable?*
Universität zu Köln

29.08.97 *Decomposing Matrices into Blocks*

16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

04.09.97 *Parallelizing the Pricing in the Dual Simplex Method*

Symposium über Operations Research 1997 (SOR 97), Jena

28.10.97 *Clustering-Probleme*

15. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis: Operations Research, Bad Honnef

17.11.97 *Mixed Integer Cutting Planes Associated with Feasible Sets*

Workshop "Computational Integer Programming", Berlin

Peter Müller**29.01.97** *Informationsdienst Visualisierung*

4. Treffen des DFN AK Informationsdienste, Berlin

Jacek Nadobny**03.04.97** *A quantitative comparison between the VSIE and the FDTD method using electrically equivalent patient and antenna models*

Poster presentation, 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, Berlin

04.04.97 *Patient models and algorithms for hyperthermia planning*

16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology ESHO-97, Berlin

13.12.97 *Some suggestions for better modeling of field singularities using the FDTD (finite difference time domain) and the VSIE/MoM (volume surface integral equation/method of moments) methods for antenna design in inhomogeneous media*
COST Action 244bis: Biomedical Effects of Electromagnetic Fields 2nd Workshop & 3rd Management Committee Meeting, Trento, Italy**Peter Nettesheim****24.05.97** *Quantum Classical Molecular Dynamics: Symplectic Integrators and Alternatives*

Second International Symposium "Algorithms for Macromolecular Modelling", Berlin

19.09.97 *Quantum Classical Molecular Dynamics: Symplectic Integrators and Alternatives*

SciCADE97, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations, Grado, Italien

Ulrich Nowak

- 24.02.97** *Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und Numerische Software für gewöhnliche Differentialgleichungen*
Sommerschule “Numerische Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen”, Hamburg
- 02.05, 09.05.97** *Eine graphische Benutzeroberfläche für numerische Software I/II*
Im Vorlesungszyklus “Anwendersysteme”, FB Informatik, FU Berlin
- 24.05.97** *Numerisch Simulieren? – Kinderleicht !?*
Berliner Tag der Mathematik, TU Berlin
- 18.07.97** *A Parallel Version of an Adaptive MOL-Method for Parabolic 1D-Problems*
Invited talk, Minisymposium, SIAMs 45th Anniversary Meeting, Stanford, USA
- 01.08.97** *Extrapolationsverfahren zur Simulation verfahrenstechnischer Prozesse*
UMSICHT e.V., Oberhausen
- 30.09.97** *A Test Frame for ODE Integrators*
Invited talk, Minisymposium, ENUMATH 97, Heidelberg
- 23.09.97** *Extrapolationsverfahren für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen*
Institut für Bioverfahrenstechnik und Reaktionstechnik, Universität Halle

Olaf Paetsch

- 07.05.97** *Online-Visualisierung von Brandversuchen an Bauteilen*
VisEng’97, Visualisierung im Ingenieursbereich, GI-FG 4.1.2 und Rechenzentrum Uni Stuttgart, Stuttgart

Jörg Rambau

- 10.02.97** *Triangulations of Cyclic Polytopes*
Workshop „Geometric Combinatorics“, Mathematical Sciences Research Institute Berkeley, USA
- 03.07.97** *Polyedrische Unterteilungen, Teil I*
ZIB-Seminar
- 08.07.97** *Polyedrische Unterteilungen, Teil II*
ZIB-Seminar
- 10.07.97** *Polyedrische Unterteilungen, Teil III*
ZIB-Seminar
- 10.09.97** *Die Spektralsequenz eines Faserbündels*
Workshop „Topologische Kombinatorik“, Arbeitsgruppe Prof. G. M. Ziegler (TU Berlin), Dahme/Brandenburg

Sebastian Reich

- 06.01.97** *Symplectic variable step-size integration and backward error analysis*
Rio de Janeiro Conference on the Foundations of Computational Mathematics,
Rio de Janeiro, Brasilien
- 19.02.97** *Backward error analysis and highly oscillatory Hamiltonian systems*
Kolloquiumsvortrag, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics,
Cambridge, England
- 07.05.97** *Rückwärtsfehleranalyse für numerische Integrationsverfahren*
Kolloquiumsvortrag, Fachbereich Mathematik, Universität Bielefeld
- 27.05.97** *Differential-algebraic equations and highly oscillatory systems*
Colloque DAE97, Grenoble, Frankreich
- 05.06.97** *Preservation of adiabatic invariants under symplectic discretization*
NSF/CBMS Conference, Golden, USA
- 26.08.97** *Long-term simulation of Hamiltonian systems*
15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied
Mathematics, Berlin
- 19.09.97** *Numerical integration of ergodic Hamiltonian systems*
SciCADE97, Grado, Italien
- 09.10.97** *Molecular dynamics: more than random numbers?*
Workshop on Multiscale Phenomena II, Max-Plank-Institut, Leipzig
- 31.10.97** *Sense and non-sense of molecular dynamics*
Kolloquiumsvortrag, University of Kansas, Lawrence, USA
- 12.11.97** *Chaotic conservative systems and numerics*
Kolloquiumsvortrag, University of Kansas, Lawrence, USA
- 21.11.97** *Numerical integration of Hamiltonian systems with a complex solution behavior*
IMA Workshop: Dynamics of Algorithms, IMA, Minneapolis, USA
- 26.11.97** *Symplektische Methoden in der Molekulardynamik*
Kolloquiumsvortrag, Fachbereich Mathematik, Universität Tübingen
- 19.12.97** *Die klassische Mechanik aus der Sicht eines Numerikers*
Fachbereich Mathematik, Freie Universität Berlin (Kolloquiumsvortrag)

Beate Rusch

- 12.06.97** *Aufgaben und Ziele der Arbeitsgruppe Fremddatenstrategie*
KOBV-Workshop, Berlin
- 25.07.97** *Der Einsatz von Fremddaten im KOBV*
KOBV-Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam

28.10.97 *Strategien zur Nutzung von Fremddaten*

Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Eine Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin

12.11.97 *Norm- und Fremddaten im KOBV*

Universitätsbibliothek der Technischen Universität Berlin

Frank Schmidt**03.04.97** *Discrete Transparent Boundary Conditions for the Fresnel Equation.*

8th European Conference on Integrated Optics, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden

19.06.97 *Transparente Randbedingungen zur numerischen Behandlung von Streuproblemen in der Integrierten Optik.*

DMV-Workshop "Wissenschaftliches Rechnen in der Elektrotechnik", Technische Hochschule Darmstadt

01.08.97 *Adaptive Multilevel Methoden für die Integrierte Optik*

Vortrag auf einer Arbeitstagung an der Universität Dortmund, Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik

20.09.97 *Discrete Transparent Boundary Conditions for the Fresnel and the Helmholtz Equation*

International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling, Enschede, the Netherlands

Christof Schütte**20.01.97** *Quanten-klassische Dynamik: Modelle und Numerik*

Physikalisches Kolloquium, HU Berlin

31.01.97 *Quantum-Classical Molecular Dynamics as an Approximation of full Quantum Dynamics*

Numerical Analysis Seminar, Courant Institute, New York, USA

14.03.97 *Symplektische Integration Hamiltonscher Systeme*

Seminarvortrag, Forschungszentrum Jülich

24.05.97 *Quantum-Classical Molecular Dynamics: Theory and Numerics including Nonadiabatic Effects*

Invited talk, Second International Symposium "Algorithms for Macromolecular Modelling", Berlin

27.06.97 *Quanten-klassische Dynamik und Takens-Chaos*

Oberseminar "Nichtlineare Dynamik", Berlin

08.07.97 *Nonadiabatic Effects in Quantum-Classical Molecular Dynamics*

Colloquium, Beckman Institute, Urbana, USA

11.09.97 *On the Singular Limit of the Quantum–Classical Molecular Dynamics Model*
Workshop “Singularly Perturbed Systems and Applications”, WIAS, Berlin

18.09.97 *Verlet based Exponential Integrators for Quantum–Classical Molecular Dynamics*
“SciCADE 97”, Grado, Italien

09.10.97 *Multiple scales and nonadiabatic effects in molecular dynamics simulations*
“Multiscale II: Analysis and efficient simulation of multiscale problems”, Max–Planck–Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig

Rüdiger Schultz

27.02.97 *Decomposition in Stochastic Programming with Integer Recourse*
International Conference on Optimization and Optimal Control, Lambrecht

10.03.97 *Einsatzoptimierung von Kraftwerken bei unvollständiger Information*
Workshop „Optimierung in der Kraftwerkstechnik“ im Rahmen des Duisburger Kongresses „Mathematik in Industrie und Wirtschaft“

04.04.97 *Echtzeit-Optimierung bei unvollständiger Information am Beispiel der elektrischen Lastverteilung*
Workshop „Echtzeit-Optimierung bei unvollständiger Information“, Berlin

14.07.97 *Decomposition in stochastic programming with integer recourse*
EURO-INFORMS, Barcelona, Spanien

15.07.97 *Unit commitment in a hydro thermal power system*
EURO-INFORMS, Barcelona, Spanien

27.08.97 *Unit commitment under uncertainty via two-stage stochastic integer programming*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

03.09.97 *Dual decomposition in stochastic integer programming*
Workshop „Optimization under Uncertainty“, HU Berlin

16.09.97 *Computational approaches to stochastic integer programming*
Department of Operations Research, University of Copenhagen, Denmark

17.11.97 *Decomposing block angular MILPs arising in stochastic programming*
Workshop „Computational Integer Programming“, Berlin

Bianca Spille

10.04.97 *Über Dickson-Semikörper*
ZIB–Seminar

05.09.97 *Über Dickson–Semikörper*
Studentenkonferenz Mathematik, Martin-Luther-Universität, Halle

17.10.97 *Blocking and anti-blocking pairs of polyhedra*

ZIB-Seminar

Detlev Stalling

03.08.97 *Line Integral Convolution on Polygonal Surfaces*

Course on Texture Synthesis with Line Integral Convolution, Siggraph 97, 24th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Los Angeles CA, USA

18.09.97 *Fast LIC with Higher Order Filter Kernels*

VisMath'97 Tagung, Berlin

Marc Steinbach

31.01.97 *Trajectory optimization by recursive multistage SQP*

18. Berliner Algorithmen-Tag, Berlin

05.02.97 *Trajectory optimization by recursive multistage SQP*

Forschungsseminar „Numerik Stochastischer Modelle“, HU Berlin

27.02.97 *Multistage SQP methods for trajectory optimization*

International Conference on Optimization and Optimal Control, Pfalzakademie Lambrecht

02./05./10.06.97 *Optimierung auf Bäumen I–III*

ZIB-Seminar

30.06.97 *Rekursive Optimierung auf Bäumen im Portfolio Management*

Institut für Unternehmensforschung, Universität St. Gallen, Schweiz

28.08.97 *Solving Portfolio Management Problems with Optimal Complexity*

16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

03.09.97 *Solving Portfolio Management Problems with Optimal Complexity*

Workshop „Optimization Under Uncertainty“, HU Berlin

Thomas Steinke

05.12.97 *Scheduling auf der Cray J90*

Fachbereich Chemie, FU Berlin

Manfred Stolle

14.02.97 *Der Backup-Service der Freien Universität Berlin – NetBackup 2.0*

Kolloquium der ZEDAT, FU Berlin

03.04.97 *UNIX-Grundkurs*

ZEDAT, FU Berlin

23.10.97 *UNIX-Grundkurs*
ZEDAT, FU Berlin

Hinnerk Stüben

12.06.97 *Optimization of T3E Programs*
Swiss Center for Scientific Computing, ETH Zürich, Schweiz

13.06.97 *The Landau Pole and the Lattice*
Swiss Center for Scientific Computing, ETH Zürich, Schweiz

27.06.97 *Wo liegt der Landau Pol? Eine Antwort der Gitterfeldtheorie*
Theoretisch-Physikalisches Colloquium, FU Berlin

26.07.97 *Solution of the Landau pole problem in QED*
Lattice '97, The XV International Symposium on Lattice Field Theory, University of Edinburgh, Schottland

Regina Urbaniak

25.08.997 *Decomposition of Integer Programs and of Generating Sets*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

Annegret Wagler

03.04.997 *Über kritisch perfekte Graphen*
Workshop "Algorithmische Diskrete Mathematik und Mathematische Optimierung", FU Berlin

28.08.97 *On Critically and Anticritically Perfect Graphs*
16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz

08.09.97 *On a New Class of Extremal Perfect Graphs*
Optimal Discrete Structures and Algorithms, Universität Rostock

Michael Walter

20.06.97 *Zentrale Komponenten des Math-Net: Datenbank, Profildienst*
2. Math-Net-Workshop, Universität Köln, 19.-21. Juni 1997

16.10.97 *Stand der zentralen Komponenten des Math-Net*
3. Math-Net-Workshop, Universität Osnabrück, 15.-16. Oktober 1997

Martin Weiser

30.09.97 *Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic Problems*
Invited talk, Minisymposium, ENUMATH 97, Heidelberg

Robert Weismantel**12.03.97** *Das Rucksackproblem*

Wissenschaftszentrum der DFG

13.03.97 *Knapsack problems and integer programming*

Kolloquium, Universität Eindhoven, Niederlande

14.03.97 *Test sets in integer programming*

Kolloquium, Universität Utrecht, Niederlande

26.08.97 *Set packing relaxations of integer programs*16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz**27.08.97** *Test sets of the knapsack problem*16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz**10.09.97** *Der Wolf, die Ziege und der Kohlkopf: Transportprobleme von Karl dem Grossen bis heute*

DFG-Kolloquium, Wissenschaftszentrum, Bonn

15.09.97 *Decomposition of integer programs and of generating sets*

European Symposium on Algorithms '97, Graz, Österreich

14.11.97 *Primale Methoden in der Ganzzahligen Optimierung*

Kolloquium, Universität Trier

18.11.97 *Primal methods in integer programming*

Workshop „Computational Integer Programming“, Berlin

Roland Wessäly**13.03 – 19.03.97** *Optimierung im Mobilfunk*

CeBIT 97, Hannover

29.04.97 *Dimensioning of Survivable Telecommunication Networks*

DIMACS Workshop on Network Design: Connectivity and Facilities Location, Princeton, USA

15.07.97 *Rerouting Lost Communication Channels*

EURO-INFORMS, Barcelona, Spanien

27.08.97 *Dimensioning the E-Plus Backbone Network*16th International Symposium on Mathematical Programming, Lausanne, Schweiz**Josef Willenborg****12.06.97** *Aufgaben und Ziele der Arbeitsgruppe Suchmaschine*

KOBV-Workshop, Berlin

25.07.97 *Die Suchmaschine des KOBV*

KOBV-Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam

28.10.97 *Die Suchmaschine im Zusammenspiel mit den Lokalen Systemen*

Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Eine Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin

Vincent Winczewski**15.10.97** *Weiterentwicklung und Anpassung von Harvest im Rahmen des Math-Net-Projekts*

3. Math-Net-Workshop, Universität Osnabrück

Malte Zöckler**03.08.97** *LIC: The LicFactory*

Course on Texture Synthesis with Line Integral Convolution, Siggraph 97, 24th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Los Angeles CA, USA

7.2 Vorlesungen und Seminare

Wolfgang Baumann: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, mit F. Thiele)

Ralf Borndörfer: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Höhere Mathematik für Wirtschaftsingenieure I* (Übung)

Manfred Brandt: Humboldt–Universität zu Berlin

WS 96/97 *Funktionentheorie II* (Vorlesung/Übung)

SS 97 *Funktionentheorie* (Vorlesung/Übung)

Peter Deuffhard: Freie Universität Berlin

WS 96/97 *Numerik partieller Differentialgleichungen* (Vorlesung)

Scientific Computing (Seminar, zusammen mit Ch. Schütte)

SS 97 *Nichtlineare Dynamik* (Gemeinsames Oberseminar des ZIB mit B. Fiedler (FU Berlin) und K. Schneider (WIAS))

Scientific Computing (Seminar, zusammen mit Ch. Schütte)

WS 97/98 *Nichtlineare Dynamik* ((Gemeinsames Oberseminar des ZIB mit B. Fiedler (FU Berlin) und K. Schneider (WIAS)))

Karin Gatermann: Freie Universität Berlin

WS 96/97 *Symmetrische Verzweigungstheorie* (Vorlesung)

SS 97 *Einführung in die Numerische Mathematik* (Vorlesung)

WS 97/98 *Algorithmische Algebraische Geometrie und ihre Anwendungen* (Vorlesung)

Martin Grötschel: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Mathematische Aspekte linearer ökonomischer Modelle* (Vorlesung)

SS 97 *Lineare Optimierung* (Vorlesung)

WS 97/98 *Kombinatorische Optimierung* (Vorlesung)

Innere-Punkte-Methoden (Seminar)

Christoph Helmberg: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Semidefinite Programmierung in der kombinatorischen Optimierung* (Seminar)

SS 97/98 *Lineare Programmierung* (Seminar)

Martin Henk: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Algorithmische Geometrie der Zahlen* (Vorlesung)

WS 97/98 *Testmengen* (Vorlesung)

Wolfram Koepf: Freie Universität Berlin

SS 97 (mit D. Schmersau (FU Berlin)) *Ausgewählte Probleme der elementaren Analysis* (Seminar)

Jens Lang: Freie Universität Berlin

WS 96/97 *Einführung in die Numerik Partieller Differentialgleichungen* (Fortbildungsveranstaltung für Geologen, Geophysiker und Geoinformatiker)

SS 97 *Numerik Partieller Differentialgleichungen: Reaktions–Diffusions–Systeme und Finite Elemente Methoden* (Vorlesung)

Numerik Partieller Differentialgleichungen: Programmierung und Simulation (Seminar, zusammen mit Ch. Schütte)

WS 97/98 *Numerik partieller Differentialgleichungen: Funktionalanalytische Grundlagen* (Vorlesung)

Alexander Martin: Rice University, Houston, USA

WS 96/97 *Polyhedral Methods in Integer Programming* (Vorlesung)

Alexander Martin: Universität Trier

WS 97/98 *Operations Research II* (Vorlesung/Übung)

Relaxierungen Kombinatorischer Optimierungsprobleme (Seminar)

Sebastian Reich: Freie Universität Berlin

WS 96/97 *Numerische Methoden für Hamiltonsche Differentialgleichungen* (Seminar, zusammen mit Ch. Schütte)

Christof Schütte: Freie Universität Berlin

WS 96/97 *Numerische Methoden für Hamiltonsche Differentialgleichungen* (Seminar, zusammen mit S. Reich)

Scientific Computing (Seminar, zusammen mit P. Deuffhard)

SS 97 *Numerik partieller Differentialgleichungen: Operator-Splitting-Methoden und Transportprobleme* (Vorlesung)

Numerik partieller Differentialgleichungen: Programmierung und Simulation (Seminar, zusammen mit J. Lang)

Scientific Computing (Seminar, zusammen mit P. Deuffhard)

WS 97/98 *Nichtlineare Dynamik* ((Gemeinsames Oberseminar des ZIB mit B. Fiedler (FU Berlin) und K. Schneider (WIAS)))

Robert Weismantel: Technische Universität Berlin

WS 96/97 *Semidefinite Optimierung* (Seminar)

Robert Weismantel: Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

WS 97/98 *Ganzzahlige Optimierung* (Vorlesung/Übung)

Über Relaxierungen Ganzzahliger Programme (Seminar)

8 Tagungen und Gäste des ZIB

8.1 Gastvorträge am ZIB

- 06.01.97** Prof. Dr. Andreas Dress (Universität Bielefeld, Fachbereich Mathematik):
Visualisierung als Werkzeug wissenschaftlicher Forschung
- 14.01.97** Jan Puzicha (Universität Bonn, Bonn):
Kombinatorische Problemstellungen in der Bildverarbeitung und neuartige Lösungsheuristiken
- 28.01.97** Dr. Mikle Abouziarov (Institute of Mechanics, Nizhny Novgorod State University, Russia):
On Second Order Godunov's Method for Nonlinear Problems of Continuum Mechanics
- 29.01.97** Volker Bach, Andreas Knauf, Uwe Strubbe (IVU, Berlin):
Anschlußoptimierung — Methodischer Ansatz und praktische Anwendung
- 10.02.97** Prof. Dr. Edward Seidel (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik):
Colliding Black Holes and Neutron Stars on Supercomputers
- 13.02.97** Zsolt Tuza (Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn):
Graph Coloring with some Restrictions: List Coloring, Precoloring Extension, Ranking
- 03.03.97** Kim Snyder (SGI/Cray Research, Inc.):
CRAY T3E Programming Differences
- 05.03.97** Prof. Christian Lubich (Mathematisches Institut, Universität Tübingen):
Exponentielle Integratoren für große Differential-Gleichungssysteme
- 17.03.97** Zsolt Tuza (Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn):
On-line and semi on-line partitioning
- 10.04.97** Bianca Spille (Universität Oldenburg):
Dickson Semikörper
- 11.04.97** Roswitha Pomp (Deutsche Bahn AG):
Aspekte der DV-unterstützten Fahrplangestaltung bei der Deutschen Bahn
- 14.04.97** Eckhardt Manske (bbw, Potsdam):
Projekt: Prozeßbegleitete Unternehmensgründung
- 24.04.97** Prof. Dr. Moiseyev (Department of Chemistry Technion Israel Institute of Technology, Israel):
Wavepacket Propagation by the t, t' -Method for Dynamics in Strong Laser Fields
- 05.05.97** Prof. Dr. Jürgen Richter-Gebert (Institut für Theoretische Informatik ETH Zürich):
Moving and Proving: Geometry on Computers

- 13.05.97** Claus Carøe (Universität Kopenhagen, Dänemark):
Solving stochastic integer programs by dual decomposition and Lagrangian relaxation
- 22.05.97** Krzysztof C. Kiwiel (Systems Research Institute, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland):
Convergence of a Simple Subgradient Level Method
- 27.05.97** Dr. Willy Govaerts (Department of Applied Mathematics and Computer Science, Belgium):
Numerical Computation of Singularities
- 28.05.97** Susanne Albers (Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken):
Online-Algorithmen
- 06.06.97** Prof. Dr. Andrew J. Hanson (Indiana University, Computer Science Department, USA):
Constrained Navigation: Finding your Way in Complex Environments
- 20.06.97** Prof. Dr. F. Hoßfeld (KFA Jülich):
Mit dem Rechner rechnen Vortrag anlässlich des Konrad-Zuse-Ehrenkolloquiums
- 20.06.97** Ch. Küttner, Fridolin Klostermeier (Intranetz GmbH, Berlin):
Mit dem Rechner disponieren Vortrag anlässlich des Konrad-Zuse-Ehrenkolloquiums
- 20.06.97** Prof. Dr. J. Weyer (RISK-Consulting/AktuarData GmbH, Köln):
Versicherungen rechnen mit uns Vortrag anlässlich des Konrad-Zuse-Ehrenkolloquiums
- 20.06.97** Dr. M. Wulkow (Computing in Technology (CiT) GmbH, Rastede):
Rechner und Reaktoren in der Kunststoffindustrie Vortrag anlässlich des Konrad-Zuse-Ehrenkolloquiums
- 02.09.97** Andrew V. Goldberg (NEC Research Institute, Inc., Princeton, USA):
Beautiful and Fast: New Minimum Cut Algorithms
- 04.09.97** Hartmut Schirmacher (Universität Erlangen-Nürnberg):
Radiosity-Methoden – Ansätze, Probleme, Ideen
- 11.09.97** Kazuo Murota (Kyoto University, Kyoto, Japan):
Discrete Convex Analysis: Variants of M- and L-convex Functions
- 11.09.97** Prof. Dr. U. Langer (Johannes-Kepler-Universität, Linz, Österreich):
Temperaturfeldsimulation in transparent wärmegeämmten Gebäudefassaden
- 21.10.97** Prof. Dr. D. Braess (Ruhr-Universität Bochum):
Ein CASCADE-Algorithmus für das Stokes-Problem
- 24.10.97** Dr. W. Merz (Technische Universität München):
Modellierung, Analysis und Simulation bei der Dopanten-Diffusion in der Halbleitertechnologie

21.11.97 Etienne de Klerk (Delft University of Technology, Delft, Niederlande):
Infeasible-start semidefinite programming algorithms via self-dual embeddings

Gastvorträge im Rahmen des Workshops “Computational Integer Programming” vom 16. bis 18.11.97

16.11.97 Dan Bienstock (Columbia University, New York, USA):
Solving Difficult Network Design Problems

16.11.97 Denis Naddef (Laboratoire de Modélisation et de Calcul de Grenoble, Grenoble, Schweiz):
Solving Symmetric TSPs to Optimality

16.11.97 Michel Goemans (CORE, Louvain-la-Neuve, Frankreich):
Solving Maximum Cut Instances to Optimality Using Semidefinite Programming

16.11.97 Franz Rendl (Technische Universität Graz, Graz, Österreich):
Solving Integer Programs Using SDP

17.11.97 Laurence Wolsey (CORE, Louvain-la-Neuve, Frankreich):
Knapsacks with a Continuous Variable, and other Mixed Integer Cuts

17.11.97 Kurt Anstreicher (University of Iowa, USA):
Continuous Nonlinear Relaxations for Maximum-Entropy Sampling and Related Problems

17.11.97 John Mitchell (Rensselaer Polytechnic Institute, USA):
Computational Experience with an Interior Point Cutting Plane Algorithm for Solving Integer Programming Problems

17.11.97 Ulrich Lauther (Siemens, München):
Slow Preprocessing of Graphs for Extremely Fast Shortest Path Calculations

17.11.97 Jean-Francois Puget (ILOG, Paris, Frankreich):
Constrained Logic Programming

18.11.97 Ed Rothberg (ILOG, Paris, Frankreich):
Math Programming from a Computer Scientist’s Viewpoint

18.11.97 Bernd Bank (Humboldt-Universität zu Berlin):
Integer Polynomial Optimization and Real Equation Solving

18.11.97 Lex Schrijver (CWI, Amsterdam, Niederlande):
Hard Integer Programming Problems Coming from Railway Timetabling

18.11.97 Stefan Thienel (Universität Köln, Köln):
Solving Optimization Problems with ABACUS

18.11.97 Sebastian Ceria (Columbia University, New York, USA):
Lift-and-Project Cuts: A New Look at Solving (Hard) Mixed Integer Programs

18.11.97 Thomas Winter (Technische Universität Braunschweig):
Computational Experiments for a Dispatching Problem

8.2 Gastaufenthalte am ZIB

Kurt Anstreicher (University of Iowa, USA)

28.–31.01.97

Haim Brézis (Universität Paris, Frankreich)

15.–18.05.97

Otto Andreas Dress (Universität Bielefeld, Fachbereich Mathematik)

06.–07.01.97

Michael Dellnitz (Mathematisches Institut, Universität Bayreuth)

21.–23.04.97 / 24.–28.08.97

Heinz W. Engl (Institut für Industriemathematik, Johannes–Kepler–Universität, Linz, Österreich)

02.–03.06.97

Mama Foupouagnigni (Université Nationale du Bénin, Bénin, Westafrika)

01.09.97–28.02.98 (DAAD-Stipendiat)

George Francis (Department of Mathematics, University of Illinois, USA)

12.–19.09.97

Marc Gaëtano (INRIA Sophia–Antipolis, Frankreich)

20.10.97–31.01.98

Andrew V. Goldberg (NEC Research Institute, Inc., Princeton, USA)

01.–04.09.97

Robert Haimes (Massachusetts Institute of Technology, USA)

27.07.–02.08.97

Andrew J. Hanson (Computer Science Department, Indiana University, USA)

06.–07.06.97

Anthony C. Hearn (Santa Monica, USA)

18.–25.05.97

Claude Huchet (INRIA Sophia–Antipolis, Frankreich)

20.10.97–01.10.98 (gefördert vom EU–Projekt OpenMath)

Oliver Junge (Mathematisches Institut, Universität Bayreuth)

21.–23.04.97

Rupert Klein (Bergische Universität Wuppertal)

28.–30.08.97

Etienne de Klerk (Delft University of Technology, Delft, Niederlande)

20.–21.11.97

Konstantin Lipnikov (Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Rußland)

13.01.–12.05.97

Christopher Meyer (Ontario, Canada)

01.05.–15.08.97

Kazuo Murota (Kyoto University, Kyoto, Japan)

10.–12.09.97

Jürgen Richter-Gebert (Institut für Theoretische Informatik ETH Zürich, Schweiz)

05.05.97

Otmar Scherzer (Institut für Industriemathematik, Johannes–Kepler–Universität,
Linz, Österreich)

02.–06.06.97

Ivo Schneider (Universität der Bundeswehr, München)

16.–18.05.97

Edward Seidel (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Potsdam)

10.02.97

Heiko Siede (Universität St. Gallen, St. Gallen, Schweiz)

19.–25.05.97

Bianca Spille (Universität Oldenburg)

09.–10.04.97

Thomas Sturm (Universität Passau)

23.01.–01.02.97

Zsolt Tuza (Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn)

01.02.–30.04.97 und 01.06.–30.06.97

Burkhard Zietz (Humboldt–Universität zu Berlin)

24.02.–18.04.97

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

18.01.97 1. Math–Net–Workshop. Veranstalter: W. Dalitz

04.04.97 Workshop „Echtzeitoptimierung bei unvollständiger Information“ im Rahmen des DFG-Schwerpunktes „Echtzeitoptimierung großer Systeme“. Veranstalter: Rüdiger Schultz und Werner Römisch (Humboldt-Universität zu Berlin)

Mai 97 Detlev Stalling, HyperPlan–Kurs, Klinikum Großhadern, München

12.06.97 KOBV–Workshop

Ziel dieses ersten KOBV–Workshops war es, Arbeitsgruppen zu den Themen Suchmaschine, Schnittstelle Suchmaschine — Lokalsystem, Fremddatenstrategie, Normdaten und Evaluierung und Test zu gründen, die anschließend ihre Diskussionen in elektronischer Form fortführen sollten. Zu den Ergebnissen dieser Arbeitsgruppen siehe <http://elib.zib.de/kobv>

- 19.–21.06.97** 2. Math–Net–Workshop, Universität Osnabrück. Veranstalter: W. Dalitz
- 20.06.97** Konrad–Zuse–Ehrenkolloquium
- 30.06.97** Besuch einer Delegation des “China State Information Centers”
- 23.–24.06.97** Antrags- und Berichtskolloquium des DFG-Schwerpunktes „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“. Veranstalter: M. Grötschel
- 25.07.97** KOBV–Workshop in Zusammenarbeit mit der UB Potsdam, Universitätsbibliothek Potsdam. Veranstalter: M. Grötschel, M. Kuberek, St. Lohrum, J. Lügger, B. Rusch, J. Willenborg
- 15.–16.10.97** 3. Math–Net–Workshop, Universität Osnabrück. Veranstalter: W. Dalitz
- 28.10.97** Der Kooperative Bibliotheksverbund (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg. Eine Informationstagung des ZIB und der Freien Universität, Referat für Weiterbildung, Staatsbibliothek zu Berlin. Veranstalter: M. Grötschel, M. Kuberek, St. Lohrum, J. Lügger, B. Rusch, J. Willenborg
- 16.–18.11.97** Workshop „Computational Integer Programming“. Veranstalter: M. Grötschel und Alexander Martin
- 27.–28.11.97** Malte Zöckler, Detlev Stalling, Jens Tröger, Olaf Paetsch, Anwender- und Programmierkurs zu den HyperPlan/Ginkgo/Firetest, Berlin
- 13.12.97** Einführung in das Internet für Mediziner. Veranstalter: Thomas Steinke in Zusammenarbeit mit der ZENECA GmbH und /etc/security

8.4 Mitveranstalter von Tagungen

Peter Deuffhard

- 21.–24.05.97** *Second International Symposium “Algorithms for Macromolecular Modelling”, Berlin*, Organisatoren: B.R. Brooks, P. Deuffhard, W.F. van Gunsteren, J. Hermans, A. Mark, B. Leimkuhler, S. Reich, R.D. Skeel
- 10.–14.08.97** *Tenth International Conference on Domain Decomposition Methods*, University of Colorado, Boulder, USA. Organisatoren: C. Farhat, Xiao–Chuan Cai, J. Mandel, Scientific Committee: P. Bjorstad, J. Bramble, T. Chan, P. Deuffhard, R. Glowinski, D. Keyes, Y. Kuznetsov, J. Periaux, O. Pironneau, A. Quarteroni, Z. Shi, W. Wendland, O. Widlund, J. Xu
- 24.–29.08.97** *15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics*, Berlin, International Program Committee. Organisatoren: A. Sydow, R. Vichnevetsky
- 22.–23.09.97** *Workshop “Scientific Computing in der Medizin” (SCMED ’97)*, Organisatoren: P. Deuffhard, A. Louis, W. Schlegel, M. Seebaaß

08.–10.10.97 *Workshop Multiscale II: Analysis and Efficient Simulation of Multiscale Problems*, Max–Planck–Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig. Organisatoren: P. Deuffhard, G. Dolzmann, S. Müller

Hans-Hermann Frese

05.–09.05.1997 *Cray User Group Conference*, San Jose, Kalifornien, USA

Martin Grötschel

03.–5.03.1997 *IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: “Multimedia in den Wissenschaften”*, Würzburg

12.06.1997 *1. Arbeitsgruppen-Treffen des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV)*, Berlin

24.–29.08.1997 *International Symposium on Mathematical Programming*, Lausanne, Schweiz

22.09.1997 *IuK-Nachmittag während des ÖMG-Kongresses*, Salzburg, Österreich

20.10.1997 *Forum Engelberg Berlin Topics '97, “Verkehr: eine Herausforderung des 21. Jahrhunderts”*, Berlin

28.10.1997 *“Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV): Ein neues Verbundkonzept für Berlin und Brandenburg”*, Workshop, Staatsbibliothek zu Berlin

Hans-Christian Hege

03.–08.08.1997 *Kurs „Texture Synthesis with Line Integral Convolution“*, , zusammen mit Detlev Stalling, Malte Zöckler und mit Kwan-Liu Ma (ICASE), Victoria Interrante (ICASE) und Brian Cabral (SGI) anlässlich der Siggraph 97, 24th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Los Angeles, USA

16.–19.09.1997 *International Workshop „Visualization and Mathematics“*, Berlin-Dahlem, Harnackhaus gemeinsam veranstaltet mit Konrad Polthier (TU Berlin); unterstützt von der Deutschen Forschungsgemeinschaft

Ulrich Nowak

24.–28.02.1997 *Sommerschule “Numerische Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen” der DMV-GAMM-GI-Fachgruppe Numerische Software*, gefördert von der Volkswagenstiftung; Organisatoren: Ch. Lubich (Universität Tübingen), U. Nowak (ZIB), P. Rentrop (TH Darmstadt), Hamburg

8.5 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 02.02.97** Internationale Tagung High Care, Bochum:
Vortrag (P. Deuffhard) mit HyperPlan-Demonstration
- 10.–11.03.97** 5. Freiburger Workshop „Digitale Bildverarbeitung in der Medizin“, Freiburg/Br:
HyperPlan-Demonstration
- 11.03.97** Technologie-Dialog Biotechnologie/Medizintechnik, Berlin, Kongreßhalle (veranstaltet vom BMBF):
HyperPlan-Demonstration
- 13.–19.03.97** CEBIT97, Hannover:
Vorführung der Tools DISCNET (Dimensioning Survivable Cellular phone NETWORKS) und LICA/CPN (Low Interference Channel Assignment in Cellular Phone Networks).
- 02.–05.04.97** ESHO-97: 16th Annual Meeting of the European Society for Hyperthermic Oncology (joint with the 9th European BSD Users Conference, Virchow-Klinikum der HUB, Medizinische Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin:
HyperPlan-Demonstration
- 20.06.97** Konrad-Zuse-Ehrenkolloquium, Berlin:
HyperPlan mit verschiedenen Anwendungen aus Medizin, Chemie und CFD
- 17.–18.07.97** Virchow-Klinikum, Begutachtung des Sonderforschungsbereichs 273, Hyperthermie, Methodik und Klinik:
HyperPlan-Demonstration
- 03.–08.08.97** Ausstellung des Lernprogramms LIC-Factory im „Creative Applications Laboratory“:
Siggraph 97, 24th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Los Angeles, USA (Auszeichnung: „most outstanding contribution“)
- 12.09.97** Fest der Ideen, beim Bundespräsidenten im Schloss Bellevue, Berlin:
HyperPlan-Demonstration
- 16.–19.09.97** VisMath'97-Tagung:
Demonstration aller Visualisierungsprojekte des ZIB
- 22.–23.09.97** Workshop SCMED'97, Berlin:
Vortrag (H.C. Hege) mit HyperPlan-Demonstration
- 26.09.97** Meeting der Teilnehmer des Forschungsverbunds „Virtuelles Gehirn“ im ZIB:
HyperPlan-Demonstration
- 24.10.97** Vortrag Urania Berlin (P. Deuffhard) mit:
HyperPlan-Demonstration

15.–18.11.97 DEGRO'97: 3. Deutscher Kongreß für Radioonkologie, Strahlenbiologie und Medizinische Physik, Leipzig:

HyperPlan-Demonstration

21.11.97 Fakultätentag Informatik, Berlin:

Vorführung HyperPlan

9 Organisatorisches

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

9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 1997 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Dieter Schumann, TUB, Vorsitzender — bis 31.03.97
- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender — ab 01.04.97
- Prof. Dr. Günther Kaindl, FUB — bis 03.08.97
- Prof. Dr. Monika Schäfer-Korting, FUB — ab 04.08.97
- Prof. Dr. Konrad Gröger, HUB
- StS Prof. Dr. Erich Thies, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur
- Peter Schallock, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe
- Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Erich te Kaat, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 05. Dezember 1997.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates.

9.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

Der Verwaltungsrat hat als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates bestellt:

Prof. Dr. Thomas Liebling	–	Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens
Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt	–	University of Pittsburgh, Pittsburgh
Dr. Joachim Römelt	–	Bayer AG, Leverkusen
Manfred Schneider	–	Krone AG, Berlin
Prof. Dr. Dieter Schütt	–	Siemens AG, München
Dr.–Ing. Erhard Winter	–	E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf (ab 05.12.1997)

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 26. und 27. Mai 1997 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group
2. DFN
3. DMV
4. ECMI
5. Forum für Zukunftsenergien
6. HGC — Hyper–G–Consortium (bis 31.12.1997)
7. Konrad–Zuse–Gesellschaft
8. NAG Users Association
9. SIAM
10. VICM 98 e.V.
11. Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. — ZKI

9.5 ZIB–Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad–Zuse–Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1997 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Michael Dellnitz (Universität Bayreuth)
Symbolisch–numerische Methoden für dynamische Systeme
- Prof. Dr. Ralf Kornhuber (Universität Stuttgart)
Monotone Mehrgittermethoden
- Prof. Dr. Rüdiger Schultz (Universität Leipzig)
Ganzzahlige stochastische Optimierung
- Dr. Thomas Wolf (University of London)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie
- Prof. Dr. Günter Ziegler (TU Berlin)
Algebraische und kombinatorische Aspekte der ganzzahligen Optimierung

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1997 wie folgt zusammen:

Peter Ertmann – Vorsitzender
Bodo Erdmann
Gabriele Kempf
Wolfgang Maibauer
Uwe Pöhle

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist durch die bekannten finanziellen Schwierigkeiten der öffentlichen Hand und der industriellen Kooperationspartner geprägt. Die kontinuierlichen Reduzierungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin konnten durch Reduzierungen der Leistungen und durch die Inanspruchnahme von Rücklagen aus den Vorjahren aufgefangen werden. Für die entscheidungsreifen investiven Vorhaben standen — unter Berücksichtigung von Finanzmitteln aus der Erstausrüstung des Neubaus — die erforderlichen Gelder zur Verfügung. Kritisch ist anzumerken, daß das Land Berlin für 1997 und 1998 keine Investitionsmittel für den Höchstleistungsrechner

bereitstellen wird. Im Rahmen der Planung für den Höchstleistungsrechner Nord besteht hier erst Hoffnung für eine Ersatzbeschaffung im Jahre 1999. Unter Einbeziehung der aufgrund der Änderung des ZIB-Gesetzes erstmals ab 1997 aus dem Wirtschaftsplan zu finanzierenden Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die korrigierten Wirtschaftsplanansätze im Jahre 1997 auf insgesamt 19.629 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 18.829 TDM und auf Investitionen 800 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen Zuschuß von 15.973 TDM. Die eigenen Erträge, insbesondere aus Kooperationen und Drittmittelprojekten, waren mit 2.643 TDM veranschlagt. Die erfreuliche Steigerung der Erträge auf rund 4.800 TDM wird mit einer vorbehaltlich des Jahresabschlusses festzustellenden Ausgabensteigerung in nahezu gleicher Höhe korrespondieren.

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (83 Stellen, — 5 Beamten- und 78 Angestelltenstellen — davon 2 Stellen ohne Bezüge und 10 Stellen durch Wegfallvermerke nicht finanziert) sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die weitere Reduktion von Personalmitteln und der daraus resultierenden erhöhten Anzahl von Stellen mit Wegfallvermerk sowie der deutlich über dem Durchschnitt liegenden Altersstruktur der unbefristet beschäftigten Belegschaft bestand allein im Personalhaushalt ein Defizit von ca. 1.300 TDM, das lediglich zur Hälfte durch personalwirtschaftliche Maßnahmen ausgeglichen werden konnte. Die Finanzierung des Fehlbetrages mußte zu Lasten der Sachmittelausgaben vorgenommen werden.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.97	01.01.98
Leitung	4	3
Wissenschaftliches Personal	70	73
Datenverarbeitung/Technik	28	26
Verwaltung/Bibliothek	13	15
Studentische Hilfskräfte	36	31
Insgesamt	151	148

10 Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik und Informatik der Freien Universität
Berlin
Tel. (030) 841 85 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls
Diskrete Mathematik am Fachbereich
Mathematik der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 210

Numerische Analysis und Modellierung:	Peter Deuffhard/ Christof Schütte	896 04 – 101 841 85 – 182
Wissenschaftliche Software:	Ulrich Nowak	841 85 – 175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans-Christian Hege	841 85 – 141
Optimierung:	Martin Grötschel/ Robert Weismantel	841 85 – 210 841 85 – 213
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85 – 173
Rechenzentrum:	N.N.	841 85 – 130
Höchstleistungsrechner:	Hubert Busch	841 85 – 135
Interne Rechenzentrumsdienste:	Wolfgang Pyszkalski	841 85 – 152
Verwaltung:	Henry Thieme	841 85 – 100
Bibliothek:	Regine Kossick	841 85 – 233

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)

Takustraße 7, D-14195 Berlin-Dahlem

Telefon: (0 30) 841 85 – 0

Telefax: (0 30) 841 85 – 125

<mailto:nachname@zib.de>

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind
über unseren WWW-Server unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

(Stand: 01.04.1998)