

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 1998



Vorbemerkung

In der Kontinuität der vergangenen Jahre legen wir auch 1998 wieder unseren Jahresbericht allen Freunden, Gönnern und interessierten Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft vor. Nach Aussage des Wissenschaftlichen Beirates des ZIB, der im Mai des vergangenen Jahres in unserem Hause getagt hat, sind wir *“ein weltweit klar führendes Institut auf den Gebieten Scientific Computing, Optimierung und Wissenschaftliche Informationssysteme”*. Wir hören es gerne, machen Sie sich selbst ihr Bild.

Seit Oktober 1998 hat *Alexander Reinefeld*, vormals PC² Paderborn, seine Tätigkeit als Leiter des Bereiches *Computer Science* aufgenommen. Er hat zugleich eine S-Professur für Praktische Informatik mit Schwerpunkt *Parallele und Verteilte Systeme* am Institut für Informatik der Humboldt-Universität zu Berlin in Adlershof inne. Eine seiner Aufgaben ist die Aufrechterhaltung und der Ausbau des von unseren HPC-Nutzern zu Recht erwarteten hochkarätigen Rechenzentrums-Service. Darüber hinaus signalisiert die Umbenennung des Bereiches das neu hinzugekommene Ziel einer Erweiterung unseres Forschungsspektrums um praxisrelevante Gebiete der Informatik – ohne diesen Ausbau würde über kurz oder lang auch unser Service an Qualität einbüßen. Mit dieser Berufung ist nun auch die Humboldt-Universität neben der Freien und der Technischen Universität im Leitungsgremium des ZIB vertreten.

Im August tagte in Berlin der *International Congress of Mathematicians*, der letztmalig 1904 in Deutschland stattgefunden hatte. Unser Vizepräsident Martin Grötschel war Präsident des internationalen Organisationskomitees. Es versteht sich von selbst, daß das ZIB, die Fachbereiche Mathematik der Universitäten und das Weierstraß-Institut (WIAS) als gute Gastgeber fungieren wollten – was über viele Monate nicht unerhebliche Kräfte gebunden hat. In der Folge dieser Tagung entstand enorme Aufmerksamkeit für Mathematik insgesamt in der Öffentlichkeit, nicht nur für die Fermat'sche Vermutung und ihren Beweis, sondern auch für Angewandte Mathematik, wie sie im ZIB betrieben wird. Jedes Jahrhundert einmal sind wir deswegen durchaus zu einer derartigen Aktion bereit.

Wie schon in den Vorjahren wurden auch 1998 wieder junge Wissenschaftler des ZIB erfolgreich wegberufen: Herr Bornemann übernahm den Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen an der TU München, Herr Weismantel den Lehrstuhl für Mathematische Optimierung an der Universität Magdeburg, Herr Reich ging als Lecturer an die University of Surrey in England. Die damit verbundene Gefahr der Austrocknung des ZIB gerade durch diese erfreuliche Art von Erfolg wurde wiederholt auch im Wissenschaftlichen Beirat des ZIB diskutiert. Abhilfe ist jedoch nicht wirklich in Sicht, es sei denn wir erlassen ein Berufsverbot für unsere jüngeren Wissenschaftler oder beschließen auf weniger interessanten Wissenschaftsgebieten zu forschen.

Eine wichtige Rolle in der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses spielt die fachliche Schwerpunktbildung gemeinsam mit den Universitäten der Region. Der Schwerpunkt *Algorithmische diskrete Mathematik* ist schon seit Jahren an TUB, FUB und ZIB in Forschung und Ausbildung wohlorganisiert. Im letzten Jahr hat nun die FUB im Verbund mit dem ZIB durch zwei Berufungen im Fach Numerische Mathematik/Scientific Computing sowie zwei weitere Berufungen auf S-Professuren in angrenzenden Gebieten (gemeinsam mit PIK, Potsdam, bzw. WIAS, Berlin) einen vergleichbaren Schwerpunkt *Scientific Computing* geschaffen, so daß nun auch hier entsprechende Synergien genutzt werden können. Angesichts der Ebbe in den Universitätskassen ist diese Anstrengung nicht hoch genug zu bewerten.

Ebenso wie den Universitäten droht auch dem ZIB Gefahr durch die kontinuierliche Reduktion des Landeszuschusses, die zu einer schleichenden Erosion unserer Basis führt. Die gerade 1998 erfreuliche Entwicklung unseres Drittmittelaufkommens sorgt im Augenblick für milde Kompensation, wird jedoch auf Dauer bei Ausbleiben von Landesmitteln zunehmend erschwert werden.

Berlin, im März 1999

Prof. Dr. Peter Deuffhard
Präsident



Das Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin-Dahlem

Inhaltsverzeichnis

1	Das ZIB — Struktur und Ziele	1
2	Forschung und Entwicklung	7
2.1	Überblick	7
2.2	Schwerpunkte	15
2.2.1	Wesentliche Moleküldynamik	15
2.2.2	Quanten–klassische Dynamik	20
2.2.3	Adaptive Multilevel-FEM	26
2.2.4	Hochfrequente Elektrotechnik	28
2.2.5	Prozeßsimulation	32
2.2.6	Medizinische Planungssysteme	35
2.2.7	Virtuelle Labors	47
2.2.8	Computeralgebra und Dynamik	57
2.2.9	Diskrete Strukturen	61
2.2.10	Nichtlineare Optimierung	65
2.2.11	Telekommunikation	68
2.2.12	Ganzzahlige Optimierung	77
2.2.13	Online-Optimierung	82
2.2.14	Verkehr	87
2.3	Auszeichnungen und Rufe	93
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	95
3.1	Überblick	95
3.2	Schwerpunkte	97
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	97
3.2.2	Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)	99
3.2.3	Informationsserver des ICM'98	101
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	103
3.2.5	WWW-Labors für numerische Software	105
3.2.6	Fachinformationsdienst Visualisierung	105

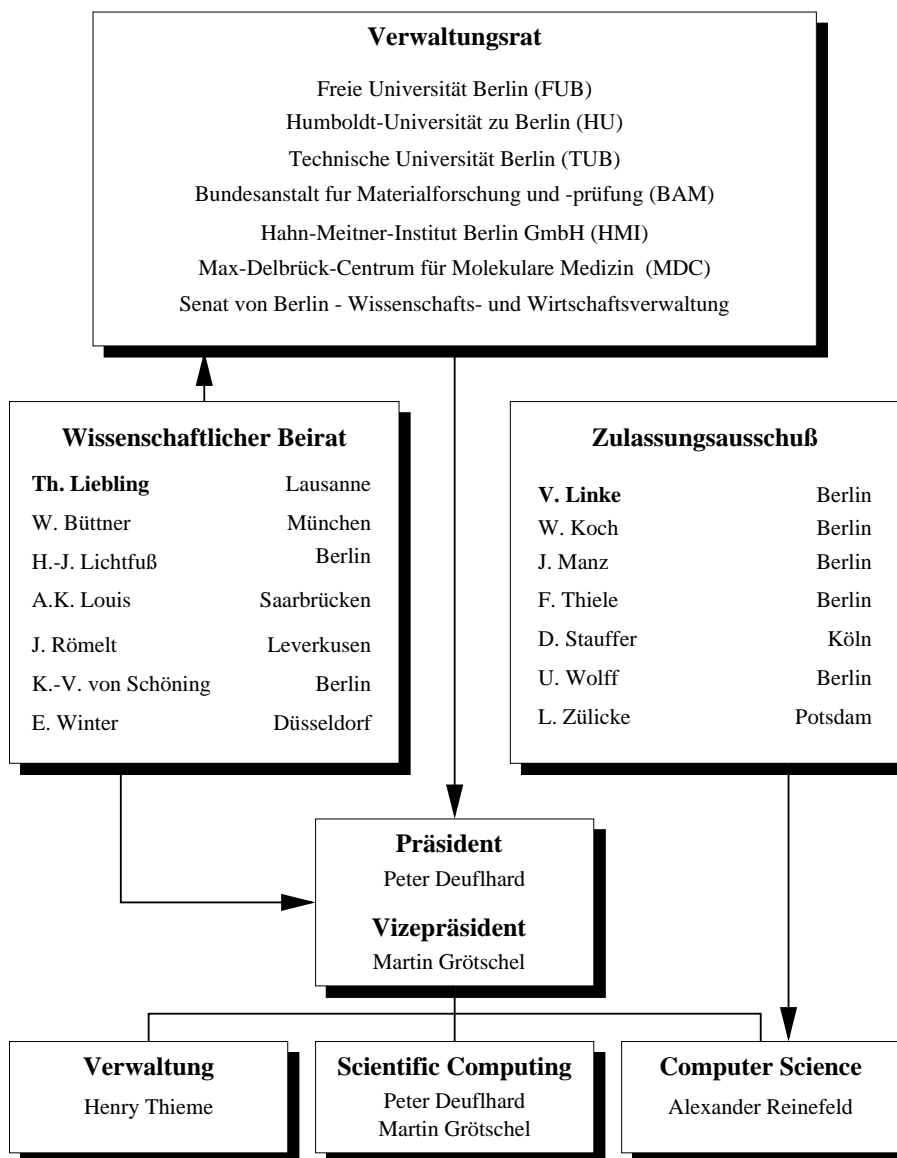
3.2.7	REDUCE	108
4	Computer Science	111
4.1	Computer Science Research	112
4.2	Hochleistungsrechner	113
4.2.1	Systemkonfiguration	115
4.2.2	Software-Ausstattung	118
4.2.3	Zulassungsausschuß	118
4.2.4	Großprojekte	118
4.3	Fachberatung	121
4.3.1	Chemie	122
4.3.2	Geowissenschaften	123
4.3.3	Ingenieurwissenschaften	124
4.3.4	Physik	124
4.4	Interne Rechenzentrumsdienste	126
4.5	Projekte des Bereiches Computer Science	127
4.5.1	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	127
4.5.2	Gigabit-Testbed Projekt des DFN	131
4.5.3	UNICORE	134
4.5.4	Metacomputing über den Atlantik	135
4.6	Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren	136
4.6.1	Norddeutscher Vektorrechner-Verbund (NVV)	136
4.6.2	Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)	137
4.6.3	Zusammenarbeit mit anderen Hochleistungsrechenzentren in Jülich, Stuttgart und Karlsruhe	137
5	Publikationen	139
5.1	Preprints	139
5.2	Technical Reports	154
5.3	Mitherausgabe von Zeitschriften	157
5.4	Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	158
5.5	Monographien	166
5.6	Habilitationen	166
5.7	Dissertationen	167

5.8	Diplomarbeiten	167
6	Produkte	169
6.1	A–Max (Version 3.0)	169
6.2	moregroebner (version 3.0)	169
6.3	symmetry (version 3.0)	169
6.4	CodeLib	169
6.5	Amira	170
6.6	HyperPlan	170
6.7	FLIC	171
6.8	DOC++	171
6.9	iTe	171
6.10	Verfahren aus der Computeralgebra	172
6.11	Informationsdienste des eLib–Servers	174
6.12	KOBV Informationsserver	175
6.13	WWW–Z39.50 Gateway	175
6.14	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	176
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern	177
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	177
7.2	Vorlesungen und Seminare	198
8	Tagungen und Gäste des ZIB	201
8.1	Gastvorträge am ZIB	201
8.2	Gastaufenthalte am ZIB	203
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	207
8.4	Mitveranstalter von Tagungen	208
8.5	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	210
9	Organisatorisches	213
9.1	Organe	213
9.2	Satzung	214
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	214
9.4	Mitgliedschaften	214
9.5	ZIB–Fellows	215

9.6	Selbstverwaltung	216
9.7	Wirtschaftliche Situation	216
9.8	Personelle Entwicklung	217
10	Ansprechpartner	219

1 Das ZIB — Struktur und Ziele

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



Forschung und Entwicklung: Scientific Computing, Computer Science

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.

Durch die Neubesetzung der Bereichsleiterposition Computer Science und die damit verbundene inhaltliche Erweiterung des fachlichen Spektrums wird in den nächsten Jahren ein Forschungsschwerpunkt auf dem Gebiet *Computer Science* aufgebaut.

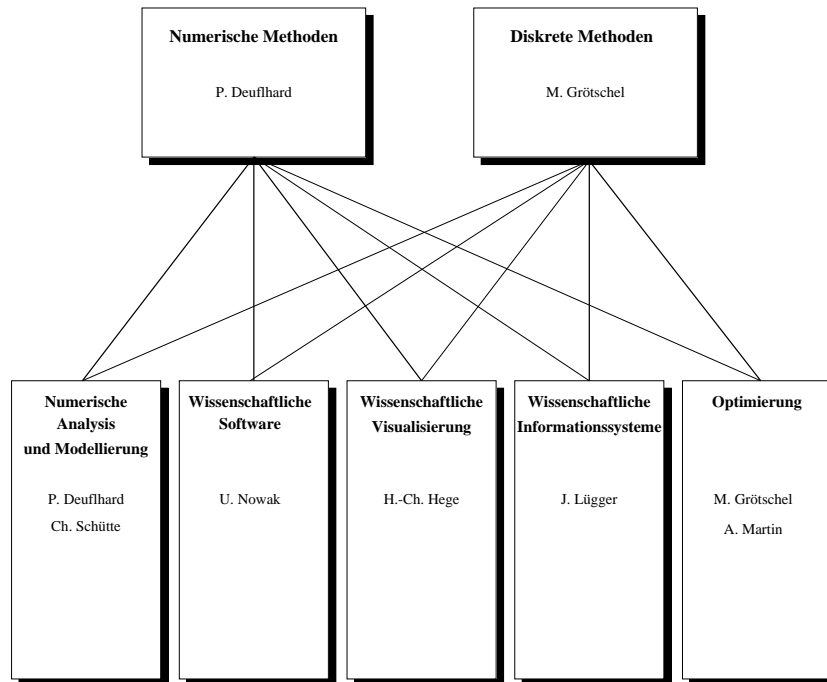
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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.

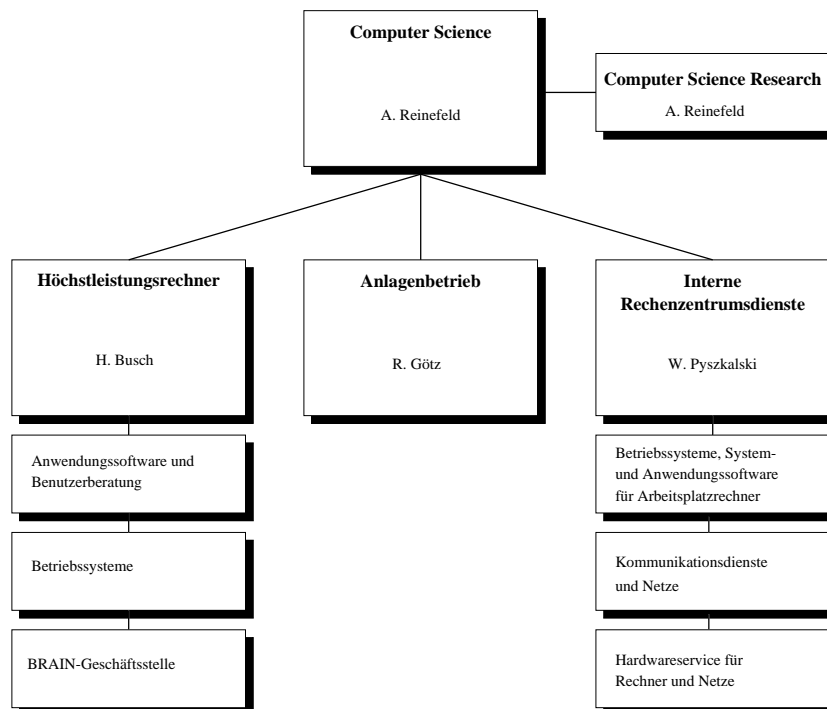
Supercomputing als Dienstleistung

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.

Bereich Scientific Computing



Bereich Computer Science



Gliederung des Bereiches Scientific Computing

Numerische Methoden

Abteilung Numerische Analysis und Modellierung. Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten Numerischen Mathematik mit Schwerpunkt nichtlineare Modelle, insbesondere Differentialgleichungsmodelle. Ziel ist die Konstruktion von effizienten und verlässlichen Algorithmen zur Simulation, Identifikation und Optimierung 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 Programm-bibliothek 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 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.

Gliederung des Bereiches Computer Science

Abteilung Höchstleistungsrechner. Zu den Hauptaufgaben zählt die Auswahl, Bereitstellung und Wartung der erforderlichen Software für den Berliner Landeshochleistungsrechner sowie die fachliche Beratung der Anwender zur effizienten Nutzung der Systeme, insbesondere bei Neuentwicklungen und Anpassungen der Codes an die spezifischen Eigenschaften der im ZIB und im Norddeutschen Vektorrechner-Verbund betriebenen Systeme. Weitere Arbeitsschwerpunkte dieser Abteilung liegen im Bereich Weitverkehrskommunikationsnetze, z.B. als Koordinator des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN, sowie in der Betreuung des Zulassungsausschusses für die Begutachtung von Rechenzeitanträgen.

Abteilung Anlagenbetrieb Aufgabe ist der Betrieb des Landeshochleistungsrechners als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im Norddeutschen Vektorrechnerverbund. Hinzu kommen statistische Auswertungen der Systemnutzung sowie allgemeine Überwachungsaufgaben.

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

Forschungsgruppe Computer Science Research. Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich paralleler und verteilter Systeme. Derzeit stehen zwei Arbeitsschwerpunkte im Vordergrund: Die Entwicklung von Methoden und Software zur kooperativen Nutzung geographisch verteilter Höchstleistungsrechner für besonders komplexe Anwendungen (Metacomputing) sowie die Implementation von Systemsoftware zum Einsatz eng gekoppelter Workstation-Cluster als dedizierte Parallelrechner.

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 *methodischen* Schwerpunkte des Vorjahres weitergeführt:

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

Aus der Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit ebenfalls wie 1997 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 kurz umrissen werden.

Wesentliche Moleküldynamik. Dieses schon seit zwei Jahren laufende Schwerpunktthema hat sich im vergangenen Jahr fokussiert auf die hierarchische Identifizierung *metastabiler Konformationen* von Molekülen. Grundlegend für unsere

mathematische Herangehensweise ist ein über die *Dynamik* definierter Begriff der Konformation, nicht zu verwechseln mit dem herkömmlichen Begriff, der sich nur auf die Analyse der *Geometrie* stützt und typischerweise in der Bioinformatik realisiert wird. Im Berichtszeitraum gelang der Arbeitsgruppe ein zweiter großer Schritt in Richtung auf einen effizienten Algorithmus zur Behandlung realistischer Biomoleküle. Die theoretische Basis dafür wurde in einer Habilitationsschrift geschaffen, in der ein maßgeschneiderter Markov-Operator konstruiert wurde: er besitzt ein rein reelles Spektrum mit einem strikt kontraktiven essentiellen Anteil und einem isolierten Cluster diskreter Eigenwerte nahe dem Perron-Eigenwert 1. Aus den zum "Perron-Cluster" gehörigen Eigenmoden gelingt schließlich die Identifikation von Konformationen mit einem neu in der Arbeitsgruppe entwickelten Algorithmus. Eine Galerkin-Diskretisierung des Operators erfolgt durch hybride Monte-Carlo-Methoden (HMC). Auch dieser Teil wurde verbessert durch Einführung adaptiver Skalierung einzelner Potentiale. Der grundlagenorientierte Teil dieser Arbeiten wird innerhalb des DFG-Schwerpunktes "Dynamische Systeme" (Sprecher: B. FIEDLER, Mathematik, FUB) gefördert. Der mehr anwendungsorientierte Teil der Arbeiten sollte als Vorarbeit für Aktivitäten innerhalb des Berliner RNA-Technologie-Netzwerkes RINA (Sprecher: V. ERDMANN, Biochemie, FUB) dienen. Leider ist jedoch im Zuge des Amtswechsels im BMBF die seit zwei Jahren in Aussicht gestellte finanzielle Förderung letztlich nicht wirklich realisiert worden. Erfreulicherweise hat das Forschungsprojekt zum Ende des Berichtszeitraums zu einer direkten Industriekooperation (Fa. AnalytiCon, Potsdam) geführt.

Quanten-klassische Dynamik. Die volle quantenmechanische Simulation molekularer Systeme erscheint auf absehbare Zeit jenseits des Rechenbaren. Deshalb gilt unser Augenmerk seit einigen Jahren gemischt quanten-klassischen Modellen der Moleküldynamik (QCMD). Während in den vorigen Jahren im wesentlichen der *adiabatische* Grenzfall ($\epsilon = 0$) untersucht worden war, standen im Berichtszeitraum *nicht-adiabatische* Kopplungen der hochfrequenten quantenmechanischen Dynamik an die langsamen "klassischen" Bewegungen ($\epsilon > 0$) im Vordergrund. Zur Beschreibung dieser nicht-adiabatischen Effekte wurde eine Erweiterung des QCMD-Modells auf Grundlage einer völlig neuen quanten-klassischen Grundgleichung entwickelt und erfolgreich angewendet. Für die bei der numerischen Umsetzung zu lösenden QCMD-Teilprobleme wurden in Zusammenarbeit mit LUBICH (Universität Tübingen) und HOCHBRUCK (Universität Düsseldorf) spezielle Integratoren vom Exponentialtyp entwickelt, die auch bei sehr großen Zeitschrittweiten eine gute Approximation der Populationsdynamik erlauben.

Adaptive Multilevel-FEM. Dieses seit vielen Jahren laufende Grundlagenprojekt zur effizienten numerischen Simulation partieller Differentialgleichungen hat zu zahlreichen Folgeprojekten in den Anwendungen geführt, z.B. in der Hochfrequenten Elektrotechnik (vgl. 2.2.4), der Prozeß-Simulation (vgl. 2.2.5) oder der Hyperthermie (vgl. 2.2.6). Anwendungsrelevante Fortschritte werden weiter un-

ten in den jeweiligen Anwendungsprojekten dargestellt. Außerdem hat sich gerade zu diesem Projekt eine rege fachliche Zusammenarbeit mit dem Weierstraß-Institut (WIAS) und der Arbeitsgruppe KORNHUBER (Mathematik, FUB) etabliert. Grundlagencharakter haben neue mathematische Resultate und algorithmische Vorschläge für zeitabhängige partielle Differentialgleichungen vom Typus Reaktion-Diffusion-Strömung, die im Rahmen einer Habilitationsschrift erzielt worden sind.

Hochfrequente Elektrotechnik. Unsere Arbeiten innerhalb eines BMBF-Projektes zur Berechnung von Moden verlustbehafteter integriert-optischer Komponenten auf der vereinfachten Modellbasis der *skalaren komplexen* Helmholtzgleichung wurden 1998 abgeschlossen. Ein Programmsystem und ein Handbuch wurden erstellt und dem Industriepartner (R. MÄRZ, Siemens) übergeben. Der entwickelte Algorithmus stellt einen neuen Baustein innerhalb der adaptiven Multilevel-FEM dar. Ebenfalls mit Siemens wurde ein neues BMBF-Kooperationsprojekt in Angriff genommen, das die Berechnung der *vektoriellen* Grundmoden optischer Wellenleiter auf der Basis der vollen Maxwell'schen Gleichungen beinhaltet. Ein erster Algorithmus liegt bereits vor und wird derzeit an relevanten Beispielen getestet. Die im Zusammenhang mit optischen Simulationen auftretenden Streuprobleme verlangen die Konstruktion geeigneter *transparenter Randbedingungen*. Die im Vorjahr in nuce beschriebene Methode zur Konstruktion solcher Randbedingungen konnte wesentlich verallgemeinert werden. Sie erlaubt nun eine systematische Herangehensweise an recht unterschiedliche Modellgleichungen, was die Methode nun auch attraktiv für ganz andere Anwendungsgebiete macht, z.B. die Akustik.

Prozeß-Simulation. Die Simulation zeitabhängiger Prozesse in Chemie und Verfahrenstechnik ist ein schon über Jahre laufender Schwerpunkt. Im Berichtszeitraum wurde der *adaptive Multilevel-FEM-Code* KARDOS (vgl. 2.2.3) softwaretechnisch weiterentwickelt, um neue Anwendungsprobleme aus der Praxis zu erschließen. Dies führte dazu, daß die Fa. BASF eine Lizenz zur Nutzung unserer Software erwarb. In Kooperation mit der Arbeitsgruppe ADLER (Chemietechnik, Universität Halle-Wittenberg) wird KARDOS zur Simulation und Parameteridentifikation von Kombinationsreaktormodellen mit komplexer Geometrie eingesetzt; daneben wird auch unser *Extrapolationscode* LIMEX als Zeitintegrationsverfahren in speziellen Linienmethodenansätzen verwendet. Seit Anfang 1999 wird das Projekt von der DFG gefördert. Ebenfalls von der DFG gefördert wird seit 1998 die Kooperation mit der Arbeitsgruppe SCHABER (Verfahrenstechnik, Universität Karlsruhe) im Bereich der Simulation von Aerosolbildung.

Medizinische Planungssysteme. Wichtigste Plattform für unsere Aktivitäten ist nach wie vor der Sonderforschungsbereich "Hyperthermie: Methodik und Klinik" sowie neuerdings auch das Graduiertenkolleg "Temperaturabhängige Effekte für die Therapie und Diagnostik". Im Berichtszeitraum wurden am ZIB neue semi-automatische Segmentierungsverfahren und verbesserte Tetraedergittergeneratoren zur Erzeugung anatomisch getreuer Gittermodelle von Patienten entwickelt,

die auch die Anpassung von deformierbaren Modellen an die aktuelle Patientenerlagerung gestatten sollen. Unsere Maxwell-Löser auf Basis adaptiver Mehrgittermethoden wurden perfektioniert. Damit wurde die Wirksamkeit des neuen kommerziellen Applikators analysiert und der Entwurf von Antennen mit verbesserten Abstrahl-Eigenschaften unterstützt. Der in den letzten Jahren am ZIB entwickelte nichtlineare elliptische Löser, ebenfalls vom adaptiven Multilevel-Typ, erlaubte auf effiziente Weise, den Wärmetransport im menschlichen Körper anhand eines nichtlinearen Perfusionsmodells realistischer zu simulieren. Der optimalen Positionierung von Thermoseeds, einer urologischen Alternative zur Operation von Prostatakrebs, soll ein vergleichbar schnelles numerisches Verfahren dienen, das derzeit in Entwicklung ist.

Darüber hinaus haben wir 1998 unsere Aktivitäten mit medizinischer Ausrichtung stark ausgeweitet. Im Vordergrund stand die Therapieplanung auch in Bereichen ausserhalb der Hyperthermie sowie Probleme der Operationsplanung. In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe LÜTH am Virchow-Klinikum der Humboldt-Universität wurden Software-Komponenten zur Planung der robotergestützten Implantation von Epithesen erarbeitet. Ein Forschungsprojekt der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt Berlin (H. RINNEBERG, PTB) für die Brustkrebserkennung mittels Infrarotlicht wurde durch Entwicklung eines Codes zur Simulation der Photonenstreuung in biologischen Medien unterstützt. Zur Förderung unseres wissenschaftlichen Nachwuchses wurde gemeinsam mit dem Heidelberger Graduiertenkolleg (W. SCHLEGEL) "Tumordiagnostik und -Therapie unter Einsatz dreidimensionaler radiologischer und lasermedizinischer Verfahren" die Tagung SCMED 98 (Scientific Computing in der Medizin) am Royal Marsden Hospital (S. WEBB) in London durchgeführt.

Virtuelle Labors. Das abstrakte Konzept der Virtuellen Labors wurde in vielfältigen Anwendungsgebieten weiter verfolgt. Generelles Ziel ist die Bereitstellung einer einheitlichen Arbeitsumgebung mit leistungsfähigen Werkzeugen zur Modellierung, Simulation, Visualisierung und Datenanalyse. Das Fundament der Virtuellen Labors bildet in allen Fällen die offene und objektorientierte Umgebung *Amira*. Sie erlaubt es, durch Hinzufügen von problemspezifischen Komponenten auf elegante und ökonomische Weise neue Lösungen für verschiedenste Anwendungsgebiete zu erstellen und dabei von einem großen Fundus an Basisfunktionen zu profitieren. Im BMBF-Verbundprojekt "Virtuelles Gehirn" (Sprecher: M. HEISENBERG, Biologie, Universität Würzburg) wird *Amira* von allen Arbeitsgruppen des Verbundes standardmäßig genutzt. Im Zuge dieser Kooperation wurde eine große Zahl neuer Werkzeuge für die Neuroanatomie realisiert, darunter statistische Analysemethoden zum Vergleich vieler Individuen, automatische Registrierungsverfahren, nicht-lineares referenzpunktbasiertes Warping sowie Geometrie-Export für das Internet. Im Projekt "Visualisierungsverfahren für die Allgemeine Relativitätstheorie" wurden in enger Kooperation mit dem Albert-Einstein-Institut (AEI) der Max-Planck-Gesellschaft (Ansprechpartner:

E. SEIDEL) und dem National Center for Supercomputing Applications (Urbana, USA) neue Werkzeuge zur Visualisierung der umfangreichen Datensätze entwickelt. Eine besondere Rolle spielte hierbei die Verteilung von Simulation und Visualisierung auf verschiedene Rechner im Netz (siehe 4.5.4 “Metacomputing über den Atlantik”). Ab 1999 werden die netzorientierten Aspekte des Vorhabens in das Projekt “Tele-Immersion: Kollision Schwarzer Löcher” einfließen, das vom BMBF/DFN gefördert werden wird. Unsere im Vorjahr begonnenen Arbeiten an einem “Virtuellen RNA-Labor” wurden wegen der unklaren Förderlage im Verbundprojekt RINA (Sprecher: V. ERDMANN, Biochemie, FUB) als erweitertes “Virtuelles Molekül-Labor” ohne RNA-Spezifikation fortgeführt, da es sich unserer Meinung nach um ein wirklich innovatives Feld mit attraktiver Perspektive handelt. Im Berichtsjahr wurden neue Verfahren zur Visualisierung entwickelt, u.a. zur Darstellung von Konformationsunterschieden, zur Identifikation von chemischen Konformationen (s. 2.2.1), zur Darstellung von molekularen Oberflächen und Grenzflächen, zur Abbildung von molekularen Eigenschaften und zur Visualisierung von zeitabhängigen, quantenmechanischen Phänomenen (s. 2.2.2).

Die mit *Amira* erzielten weithin sichtbaren Erfolge führten zu einer starken Nachfrage nach dieser Software und damit zu einer Reihe von zusätzlichen Aufgaben, wie etwa Portierung auf andere Hardware-Plattformen und Betriebssysteme sowie Bereitstellung, Support, Dokumentation von Software usw. Derlei Aufgaben liegen nicht mehr im direkten Arbeitsspektrum des ZIB. Um den von uns ausdrücklich gewünschten Technologie-Transfer dennoch zu leisten, wurde die Gründung einer Spin-Off-Firma vorbereitet, die im Frühjahr 1999 erfolgt ist.

Computeralgebra und Dynamik. In diesem bisher reinen Grundlagenprojekt geht es um die Systematisierung von Rechnungen, wie sie typischerweise in der Theorie dynamischer Systeme auftreten. Schwerpunkt der Arbeit war die computeralgebraische Ausnutzung von Symmetrien in äquivarianten Systemen. Besondere Fortschritte ergaben sich im Rahmen einer Habilitation in der algorithmischen Entdeckung von Invarianten: durch *Reduktion auf den Orbitraum* können geeignete Koordinaten derart bestimmt werden, daß eine vereinfachte Untersuchung von Stabilität und Verzweigungsphänomenen möglich wird. Darüber hinaus wurden für die Berechnung von Erhaltungsgrößen (conservation laws) bei partiellen Differentialgleichungen neue computeralgebraische Methoden entwickelt, die eine Klassifizierung und Linearisierung von Evolutionsgleichungen erlauben.

Der Bereich **Diskrete Methoden** setzt sich aus den Abteilungen *Optimierung* und *Wissenschaftliche Informationssysteme* zusammen. Die Aktivitäten reichen von der mathematischen Modellierung über die theoretische Grundlagenforschung und die algorithmische Umsetzung bis hin zum Transfer in die betriebliche Praxis. Wie in den vergangenen Jahren legten wir besonderen Wert auf die Verflechtung von Theorie und Praxis. Dabei inspirierten einerseits konkrete praktische Probleme neue theoretische Fragestellungen, umgekehrt erlaubten die neu gewonnenen theoretischen Erkenntnisse und deren Umsetzung die Lösung von

Anwendungsproblemen neuer Dimensionen. Der Erfolg dieses Konzepts ist beispielsweise durch zahlreiche Drittmittelförderungen (von Seiten des BMBF, der DFG und der Industrie) dokumentiert.

Die Aktivitäten unseres Bereichs im Berichtszeitraum 1998 gliedern sich in folgende Schwerpunkte:

Optimierung

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

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Information und Kommunikation im Wissenschaftsbereich
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen.

Im folgenden geben wir einen kurzen Überblick zu den einzelnen Themen. Für ausführliche Beschreibungen der Projekte verweisen wir auf die nachfolgenden Einzeldarstellungen. Eine entsprechende Beschreibung der Schwerpunkte der Abteilung *Wissenschaftliche Informationsdienste* findet sich im Kapitel 3.

Ganzzahlige Optimierung. Die ganzzahlige Optimierung ist seit Jahren ein Schwerpunkt unserer Arbeitsgruppe. Zum einen konzentrieren wir uns auf speziell strukturierte Probleme, die aus konkreten praktischen Anwendungen kommen (siehe z. B. Projekt *Auftragsplanung für nicht identische Maschinen mit hohen Rüstkosten*) und entwickeln, basierend auf mathematischen Methoden, effiziente Algorithmen zu deren Lösung. Darüber hinaus steht im Mittelpunkt unserer Forschung die Entwicklung von generellen Konzepten und Tools, die auf ein beliebiges (ohne spezielle Struktureigenschaften) ganzzahliges Optimierungsproblem anwendbar sind. Die Vorteile dieser Vorgehensweise liegen auf der Hand: Sie führt einerseits zu einem tieferen theoretischen Verständnis der zugrundeliegenden Probleme und erlaubt andererseits den Zugang zu einem größeren Spektrum an Anwendungen. Die Projekte *Kombinatorische Relaxierungen* und *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung* geben Zeugnis von dieser Arbeit.

Diskrete Strukturen. Graphen und Polyeder tauchen in vielen mathematischen Modellen kombinatorischer Optimierungsprobleme als zugrundeliegende diskrete Struktur auf. Ihre Untersuchung führt dabei auch auf grundlagentheoretische Fragestellungen, die für sich schon interessant sind. Ist die dem Problem zugrundeliegende Struktur z. B. ein perfekter Graph, so sind einige damit verbundene kombinatorische Optimierungsprobleme „leichter“ lösbar als im allgemeinen Fall. Wie weit ein gegebener Graph davon entfernt ist, perfekt oder nicht perfekt zu sein, wird im Projekt *Stabile Mengen und perfekte Graphen* untersucht; ein Konzept, das auch in der reinen Graphentheorie von Interesse ist. In der algorithmischen Geometrie ist eine häufig zugrundeliegende Struktur eine Punktkonfiguration im euklidischen Raum, meistens in der Ebene. Die Struktur der Menge aller möglichen Unterteilungen von Punktkonfigurationen bietet eine Grundlage für die Entwicklung von Algorithmen beispielsweise zur bestmöglichen Triangulierung. Tiefergehende Untersuchungen haben darüber hinaus ganz andere, unerwartete Verbindungen zur Algebra, Geometrie und Topologie offengelegt. In dem Projekt *Polyedrische Unterteilungen* beschäftigen wir uns mit Unterteilungshalbordnungen spezieller Punktkonfigurationen.

Nichtlineare Optimierung. In diesem Arbeitsgebiet werden zwei Klassen schwieriger nichtlinearer Optimierungsprobleme untersucht, und zwar konvexe Probleme aus der mehrstufigen stochastischen Optimierung sowie semidefinite Programme. Letztere betrachten wir insbesondere im Zusammenhang mit Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme. Zur Lösung kommen in beiden Fällen Innere-Punkt-Methoden zum Einsatz. Struktureigenschaften werden in den semidefiniten Programmen durch Spektrale Bündelverfahren, in der stochastischen Optimierung durch spezielle rekursive Algorithmen ausgenutzt. In Zusammenarbeit mit der Universität St. Gallen soll ein Code zur stochastischen Optimierung ab 1999 beim Portfoliomanagement einer Versicherung erprobt werden.

Online-Optimierung. Für viele Problemstellungen aus der Praxis modelliert die klassische Offline-Optimierung die vorliegende Situation nur ungenügend. Die Probleme erfordern Entscheidungen, die unmittelbar und ohne Wissen zukünftiger Ereignisse getroffen werden müssen: Oft sind zu Beginn nicht alle Daten bekannt oder es treten während des Betriebs Störungen auf, die zu einer Reoptimierung zwingen. Beispiele für natürliche Online-Probleme sind das Routing und Verteilen von Telefongesprächen, die Steuerung von Aufzügen oder das Paging in virtuellen Speichersystemen. Bei vielen Online-Problemen sind in der Praxis auch noch zusätzlich Echtzeitrestriktionen gegeben: Das System bzw. der Optimierungs-Algorithmus muß nach einer beschränkten Rechenzeit auf neue Anforderungen reagieren. In diesem Schwerpunkt verfolgen wir das Ziel, praxistaugliche mathematische Modelle für die Optimierung von Online- und Echtzeit-Aufgaben zu entwerfen, diese Modelle mathematisch zu untersuchen und daraus algorithmische Strategien abzuleiten. Wir befassen uns dabei in mehreren Projekten mit der Echtzeitsteuerung von Transportsystemen. Zur

Analyse von Online-Algorithmen setzen wir dabei als mathematisches Hilfsmittel die kompetitive Analyse ein, bei der man den Zielfunktionswert der von einem Online-Algorithmus generierten Lösung mit dem einer optimalen Offline-Lösung vergleicht. Als mathematische Grundlage zur Gewinnung von Algorithmen werden neben den LP- und Lagrange-Techniken auch graphentheoretische Methoden eingesetzt. Die Projekte dieses Themenkreises werden von der DFG gefördert. Desweiteren besteht eine Kooperation mit der Herlitz PBS AG (Berlin).

Verkehr. Im Bereich Verkehr ist die Entwicklung nach Jahrzehnten der Expansion an Grenzen gestoßen: *Er [der Verkehr] verbraucht heute annähernd soviel Energie wie die industrielle Produktion. Immer häufiger stößt er an Kapazitätsgrenzen der Infrastruktur. [...] Ein wettbewerbsfähiger Standort Deutschland braucht auch in Zukunft ein leistungsfähiges und umweltverträgliches Verkehrssystem. Deshalb konzentriert die Bundesregierung ihre Politik auf die Verbesserung der Effizienz des Verkehrssystems ...*“, wie es im Vorwort und in den Zielfeldern der Mobilitätsforschungsinitiative der Bundesregierung von 1997 heißt. Wir versuchen in diesem Schwerpunkt, einen mathematischen Beitrag zur Optimierung der Verkehrssysteme zu leisten. Wir konzentrieren uns derzeit auf den öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV). Unsere Projekte erstrecken sich von der mathematischen Grundlagenforschung bis zur betrieblichen Anwendung. Wir arbeiten an der Umlaufplanung (Fahrzeugeinsatz) und an der Dienstplanung (Personaleinsatz). Unsere Kooperationspartner sind zwei mit marktführende Softwarehäuser, die HanseCom GmbH (Hamburg) und die IVU GmbH (Berlin). Auf der nächsten Transferebene kooperieren wir mit den Verkehrsbetrieben von Hamburg (HHA) und Berlin (BVG), um zu Erfolgen in der betrieblichen Praxis zu kommen.

Telekommunikation. Die Liberalisierung der Telekommunikationsmärkte zwingt die Marktteilnehmer (Anbieter und Nachfrager) zu einer effektiveren und kostengünstigeren Nutzung der Ressourcen. Die auftretenden Problem- und Fragestellungen können häufig als diskrete Optimierungsprobleme formuliert werden und ermöglichen damit den Zugang mathematischer Methoden. Unsere Arbeitsgruppe arbeitet in diesem Zusammenhang an sieben Projekten, die alle konkreten Anwendungsbezug haben und durch die Industrie gefördert werden. Unsere Kooperationspartner sind die Bosch-Telecom GmbH (Backnang), die E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), der Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin) sowie die Siemens AG (München). Die verwendeten mathematischen Methoden reichen von Schnittebenen- und Spaltengenerierungsalgorithmen, über primale und duale Heuristiken bis hin zu Verfahren, die auf Warteschlangentheorie basieren.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Wesentliche Moleküldynamik

Die Arbeitsgruppe “Moleküldynamik” am ZIB konzentriert sich seit einigen Jahren auf die Konstruktion von Algorithmen und Modellen zur Beschreibung der wesentlichen Aspekte des dynamischen Verhaltens molekularer Systeme. In den vergangenen Jahren stand die Behandlung sehr schneller Freiheitsgrade im Vordergrund (Eliminierung mittels Homogenisierung, asymptotische Analyse). Diese Aspekte wurden 1998 hauptsächlich im Projektschwerpunkt “Quanten-klassische Dynamik” (2.2.2) weiterverfolgt, während die Arbeitsgruppe ihr Interesse im vergangenen Jahr den zeitlich langskaligen Prozessen zugewandt hat. Im Zentrum der Bemühungen stand dabei die Beschreibung der *Konformationsänderungen* von Biomolekülen.

Theorie und Numerik der Konformationsdynamik

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

Kooperationspartner: M. Dellnitz, O. Junge (Universität Paderborn)

Förderung:

DFG im Rahmen des SPP „Ergodentheorie und effiziente Simulation dynamischer Systeme“

In den vergangenen zwei Jahren gelang der Entwurf eines völlig neuen Algorithmus zur statistischen Beschreibung der Dynamik von Konformationsänderungen molekularer Systeme. In der ersten Phase des Projektes konnten die aus dem Gebiet “Dynamische Systeme” kommenden Ideen zur Charakterisierung *fast-invarianter Mengen* auf die Bestimmung von Konformationen molekularer Systeme übertragen werden [1]. Allerdings hätte dieses Konzept eine Anwendung auf molekulare Systeme realistischer Größe nicht erlaubt. Daher wurde das Konzept in der zweiten Projektphase fast vollständig umgearbeitet, so daß um die alte Grundidee herum ein neuartiger, im Rahmen der statistischen Mechanik formulierter und speziell auf molekulare Systeme angepaßter Algorithmus entstand. Diese Umarbeitung konnte Anfang 1998 mit den Publikationen [3, 5] abgeschlossen werden. Dieser neuen Methode liegt eine *dynamische* Definition von Konformationen als spezielle fast-invariante Mengen zu Grunde, die sich wesentlich von dem üblicherweise rein geometrischen Verständnis unterscheidet (s. “Weitere Aktivitäten”). Dieser Zugang gestattet die hierarchische Identifizierung metastabiler Konformationen und die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen diesen Konformationen.

Im weiteren Verlauf des Berichtszeitraums wurde eine grundlegende theoretischen Absicherung dieses algorithmischen Konzeptes erarbeitet, die einzelnen Teilschritte des Algorithmus wurden im Hinblick auf die Anwendung auf große Biomoleküle

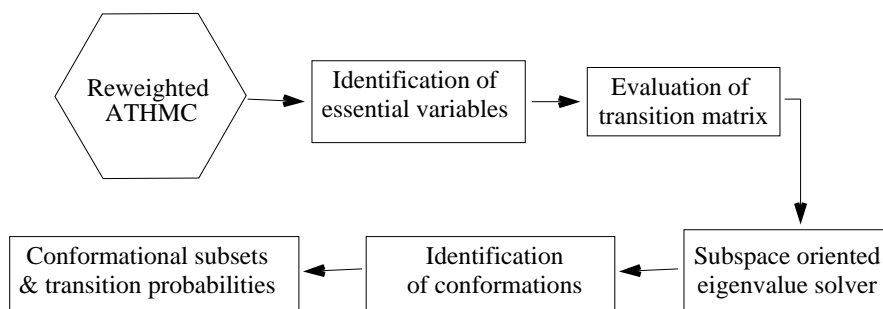


ABBILDUNG 2.1: Grundlegende Teilschritte des Algorithmus.

verfeinert und anhand erster biologisch relevanter Moleküle ausgetestet.

Zur theoretischen Absicherung des Verfahrens wurden vor allem die Eigenschaften des für die statistische Beschreibung der Konformationsdynamik grundlegenden Markov-Operators untersucht. Die Konformationen des molekularen Systems werden in Verbindung gebracht mit den Eigenvektoren zu speziellen isolierten Eigenwerten dieses Operators, was bestimmte Bedingungen an sein essentielles Spektrum voraussetzt. Tatsächlich gelang der Nachweis, daß diese Bedingungen für eine sehr allgemeine Problemklasse erfüllt sind [4]. Aus der Analyse der Eigenschaften des Operators ergab sich zusätzlich, daß die mit ihm assoziierte Markov-Kette durch sogenannten hybride Monte-Carlo (HMC) Verfahren approximiert werden kann. Diese Einsicht erlaubt zum einen ein besseres Verständnis dieser Verfahren [4]. Zum anderen ergibt sich in natürlicher Weise ein HMC-basierter Algorithmus zur geeigneten effizienten Abtastung des Phasenraums des Moleküls (siehe Projekt HMC-Methoden).

In seiner jetzigen Version besteht der Algorithmus aus den in Abbildung 2.1 gezeigten Teilschritten [6]. Neben dem HMC-basierten Abtastverfahren ist vor allem der Schritt zur Identifikation der essentiellen Variablen (oder konformationellen Freiheitsgrade) des Moleküls von wesentlicher Bedeutung für die Effizienz des Gesamtverfahrens. Für diesen Teilschritt konnte im Berichtszeitraum durch die Übertragung eines von der Arbeitsgruppe Groningen (AMADEI et al.) entwickelten Bestimmungs-Algorithmus auf innere Torsionsfreiheitsgrade des Moleküls [7] ein wesentlicher Fortschritt erzielt werden.

Basierend auf den von dem Monte-Carlo Prozeß gelieferten Abtastdaten und der automatischen Bestimmung der essentiellen Variablen ist dann letztlich die Diskretisierung des Markov-Operators und die Berechnung von Konformationen möglich. Diese letzten Teilschritte konnten in sehr allgemeiner Weise auf die Identifizierung fast-invarianter Aggregate der zur Diskretisierung des Markov-Operators gehörenden nahezu entkoppelten Markov-Kette zurückgeführt werden [3].

Der Gesamtalgorithmus wurde mit Erfolg auf das Triribonukleotid Adenylyl(3'-

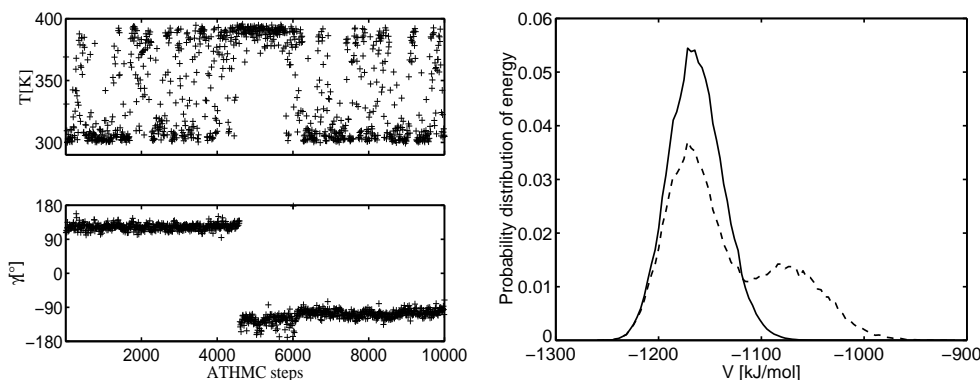


ABBILDUNG 2.2: Links: Ausschnitt aus einer ATHMC Simulation. Der Übergang zu einer höheren Temperatur ermöglicht den Wechsel in eine neue Konformation. Rechts: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Energie vor (---) und nach (—) Umgewichtung auf die kanonische Dichte ergibt ein statistisch verlässliches Ergebnis.

5')cytidyl(3'-5')cytidin (im weiteren kurz mit r(ACC) bezeichnet) angewendet [7, 6], weitere Arbeiten für größere Biomoleküle sind in Planung.

Hybride Monte-Carlo Methoden für Biomoleküle

Bearbeitet von: Alexander Fischer, Frank Cordes, Christof Schütte

Im Mittelpunkt dieses Projekts steht die Weiterentwicklung von HMC-Methoden und deren Integration in das Gesamtkonzept der wesentlichen Moleküldynamik (Abbildung 2.1). Die Existenz fast invarianter Mengen von Molekülzuständen führt beim Abtasten des Konfigurationsraums eines Biomoleküls durch Monte-Carlo Simulation zu einer schlechten Konvergenz, da diese Mengen einem schnellen Durchmischen der zugrundeliegenden Markov-Kette entgegenwirken [6]. Bereits im vorhergehenden Jahr wurde daher eine HMC-Variante mit adaptiver Temperaturwahl (ATHMC) vorgestellt, die eine Überwindung von Energiebarrieren ermöglicht und somit Konformationswechsel induziert. Rechnungen am Modellsystem r(ACC) haben gezeigt [8], daß Übergänge zwischen den fast invarianten Zustandsmengen erleichtert werden und die kanonische Verteilung nach Umgewichtung der Daten auf eine feste Temperatur sehr gut wiedergegeben wird (Abbildung 2.2).

Ein neu implementiertes Verfahren zur Abschätzung der Konvergenz durch den Vergleich der Varianzen von Observablen, z.B. potentieller Energie und Torsionswinkel, die aus unabhängig voneinander gestarteten Markov-Ketten resultieren, bestätigt das bessere Abtastverhalten der ATHMC-Variante. Diese Verbesserung ist ebenfalls an den Eigenwerten der diskretisierten HMC-Operatoren abzulesen.

Die Verwendung unabhängiger Markov-Ketten ermöglichte außerdem eine einfache Parallelisierung des Verfahrens. Nach Durchführung einer kurzen HMC-

Simulation zur Bestimmung der ATHMC-Parameter und anschließender Konformationsanalyse [7] können unabhängige Prozesse von verschiedenen Konformationen parallel gestartet werden. Die wechselseitige Beziehung zwischen Konformationsanalyse und Simulation kann außerdem zum Einfrieren strukturell invarianter Gruppen, z.B. planarer Ringe, genutzt werden. Diese können im vorliegenden Programm als starre Körper behandelt werden.

Da die Funktion von Biomolekülen nur unter Berücksichtigung der Wasserpolarisation verstanden werden kann, wurde das Modellsystem um eine große Anzahl explizit modellierter, starrer Wassermoleküle erweitert. Die Berücksichtigung periodischer Randbedingungen durch Reaktionsfeld- oder Ewaldansatz wurde implementiert. Testrechnungen haben gezeigt, daß sich bei Erhöhung der Dimension des Konfigurationsraums der ATHMC-Algorithmus als schwerfällig erweisen kann, da sich Änderungen in der Temperatur auf das gesamte Potential auswirken und ein statistisch verlässliches Reweighting erschweren. Eine Weiterentwicklung der Methode beruht daher auf der Skalierung von einzelnen Potentialanteilen, z.B. Torsionswinkel- oder Lennard-Jones-Potential für Molekül- und Wasserbereich, durch die Energiebarrieren im Sinne von ATHMC gezielt herabgesetzt werden. Dieser Ansatz wurde an einem einfachen Modell für Alkane getestet, wobei deutliche Verbesserungen gegenüber ATHMC zu erkennen waren.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Statistische Analyse von Simulationen an Biomolekülen (Wilhelm Huisinga, Christoph Best, Frank Cordes, Rainer Roitzsch, Christof Schütte)

Neben der theoretischen Fundierung und algorithmischen Entwicklung wurde das Konzept der Dynamik molekularer Konformationen zu bereits bestehenden statistischen Analyseverfahren biomolekularer Simulationsdaten in Beziehung gesetzt. Hierzu zählen einerseits die Bestimmung wesentlicher Freiheitsgrade, andererseits das Konzept geometrischer Konformationen, in welchem Konformationen als Mengen sich geometrisch ähnelnder Zustände aufgefaßt werden.

Im Berichtszeitraum wurde ein Algorithmus zur Identifikation geometrischer Konformationen entworfen, der aufgrund der gewählten Repräsentation (Abstandsmatrixdarstellung) unabhängig von störenden Rotationen und Translationen des Moleküls ist und hierarchisch die gesuchten geometrischen Konformationen bestimmt [7]. Am Beispiel des Triribonukleotids r(ACC) zeigte sich, daß dynamische Konformationen den bereits etablierten Anforderungen geometrischer Ähnlichkeiten genügen, jedoch durchaus geometrisch ähnliche Zustände in zwei Konformationen aufteilt werden, wenn diese dynamisch nur schwach korreliert sind (siehe Abbildung 2.3). Im Gegensatz zu rein geometrisch definierten Konformationen ist zudem die Berechnung von Halbwertszeiten sowie von Übergangswahrscheinlichkeiten möglich [6, 7].

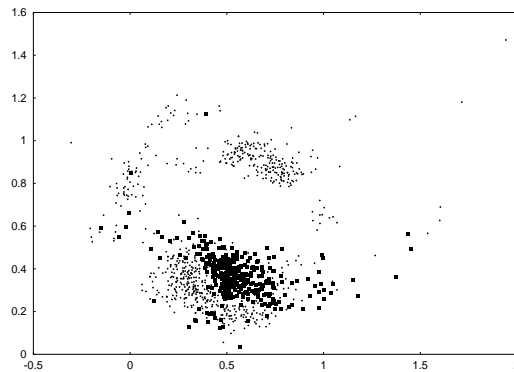


ABBILDUNG 2.3: Darstellung einer dynamischen Konformation (Quadrate) im Raum aller abgetasteten Zustände (Punkte). Benachbarte Punkte entsprechen geometrisch ähnlichen Zuständen (siehe auch Projekt “Virtuelles RNA-Labor” im Schwerpunkt 2.2.7 und [9]).

Publikationen

- [1] P. DEUFLHARD, M. DELLNITZ, O. JUNGE, AND CH. SCHÜTTE, *Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques*, in [2], pp. 98–115, 1998.
- [2] P. DEUFLHARD, J. HERMANS, B. LEIMKUHLER, A. MARK, S. REICH, AND B. SKEEL (editors), *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 4, Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [3] P. DEUFLHARD, W. HUISINGA, A. FISCHER, AND CH. SCHÜTTE, *Identification of Almost Invariant Aggregates in Nearly Uncoupled Markov Chains*, Preprint SC 98–03, ZIB, 1998.
- [4] CH. SCHÜTTE. *Conformational dynamics: Modelling, theory, algorithm, and application to biomolecules*. Habilitationsschrift, eingereicht beim Fachbereich Mathematik und Informatik der FU Berlin im Oktober 1998.
- [5] CH. SCHÜTTE, A. FISCHER, W. HUISINGA, AND P. DEUFLHARD, *A Hybrid Monte-Carlo Method for Essential Molecular Dynamics*, Preprint SC 98–04, ZIB, 1998.
- [6] CH. SCHÜTTE, A. FISCHER, W. HUISINGA, AND P. DEUFLHARD, *A Direct Approach to Conformational Dynamics based on Hybrid Monte Carlo*, Preprint SC 98–45, ZIB, 1998.
- [7] W. HUISINGA, C. BEST, F. CORDES, R. ROITZSCH, AND CH. SCHÜTTE, *From simulation data to essential conformations: A comparison of methods*, Preprint SC 98–36, ZIB, 1998.

- [8] A. FISCHER, F. CORDES, AND CH. SCHÜTTE, *Hybrid Monte Carlo with Adaptive Temperature in Mixed-Canonical Ensemble: Efficient Conformational Analysis of RNA*, J. Comput. Chem. **19**(15), pp. 1689–1697, 1998.
- [9] C. BEST AND H. C. HEGE, *Visualizing conformations in molecular dynamics*, Preprint SC 98–42, 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 nicht möglich ist. Daher sucht man nach sogenannten *gemischt quanten–klassischen* Modellen, die die Integration 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 die Entwicklung neuartiger Modelle für gewisse nicht–adiabatische Situationen, deren korrekte Behandlung für eine erfolgreiche Anwendung quanten–klassischer Simulationen von zentraler Wichtigkeit ist. Parallel dazu wurde die Weiterentwicklung passender numerischer Integratoren fortgesetzt; im Zentrum stand dabei das Problem der Reproduktion der hochoszillatorischen Phase beim Einsatz spezieller exponentieller Integratoren, die besondere große Zeitschritte ermöglichen sollen.

Nicht–adiabatische Effekte

Bearbeitet von: Christof Schütte, Peter Nettessheim

Kooperationspartner: B. Schmidt (Freie Universität Berlin, Fachbereich Chemie), F.A. Bornemann (TU München)

Im quanten–klassischen Moleküldynamik (QCMD) Modell sind die quantendynamisch beschriebenen Freiheitsgrade (Elektronen oder Protonen mit “kleiner” Masse m) an die klassische, Hamiltonsche 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 $\epsilon = m/M \rightarrow 0$. Dieser

Grenzfall wird unter *Nicht-Resonanz-Bedingungen* durch das sogenannte *adiabatische* oder *Born-Oppenheimer* (BO) Modell beschrieben. Es ist seit langem bekannt, daß das BO Modell in vielen Fällen eine gute Näherung der vollständig quantenmechanisch beschriebenen Dynamik des zu untersuchenden Moleküls liefert, daß es aber sogenannte *nicht-adiabatische* Situationen gibt, in denen das BO Modell vollständig versagt. Nun sind gerade diese Situationen aber entscheidend für vielfältige Effekte, an deren präziser Beschreibung starkes Interesse besteht (z.B. Bindungsdynamik zwischen molekularen Subsystemen).

In 1997 stand vor allem die Diskussion der Frage im Vordergrund, unter welchen Bedingungen das quanten-klassische Moleküldynamik (QCMD) Modell den adiabatischen Grenzfall korrekt beschreibt und wie es sich in nicht-adiabatischen Situationen verhält. Diese Arbeiten wurden 1998 fortgesetzt [6, 7], wobei vor allem für den Fall nicht-adiabatischer Effekte an sogenannten *vermiedenen Kreuzungen* von Energieniveaus des Quantensystems erhebliche Fortschritte erzielt werden konnten [3].

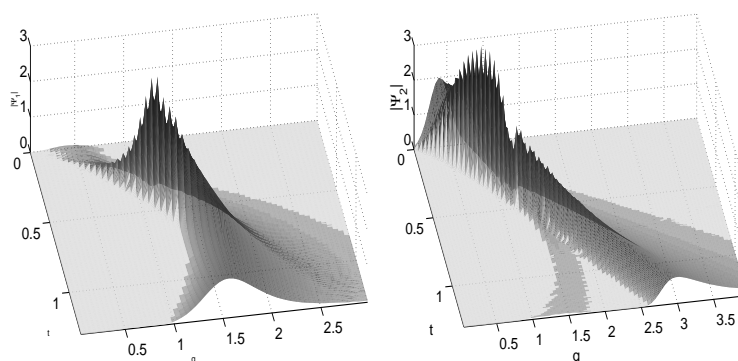


ABBILDUNG 2.4: Transport eines Wellenpakets $\Psi = (\psi_1, \psi_2)$ über eine vermiedene Kreuzung bei voll quantendynamischer Rechnung. Gezeigt ist die Entwicklung der Amplitude der beiden Komponenten $\psi_j = \psi_j(q, t)$, $j = 1, 2$, in Zeit und Ort. Bei $t \approx 0.4$ und $q \approx 1$ befindet sich eine vermiedene Kreuzung, deren nicht-adiabatischer Effekt das Auseinanderlaufen der beiden Pakete bewirkt.

Das QCMD-Modell liefert beim Durchlaufen solcher vermiedener Kreuzungen eine erheblich bessere Beschreibung als das BO-Modell. Dennoch können wesentliche nicht-adiabatische Aspekte auch mit QCMD nicht reproduziert werden, da QCMD (wie das BO-Modell auch) nur einen klassischen Pfad enthält und daher Aufspaltungsvorgänge, wie z.B. den in Abbildung 2.4 gezeigten, nicht beschreiben kann. Aus diesem Grund haben wir Verallgemeinerungen von QCMD formuliert, in denen das Aufspalten von QCMD-Trajektorien gemäß der nicht-adiabatischen Umbesetzung der Energieniveaus möglich ist. Zur Vermeidung einer explosionsartig anwachsenden Kaskade von zu berücksichtigenden Teiltrajektorien wurde eine stochastische Realisierung dieses Algorithmus entwickelt, die eng mit sogenannten “surface hopping” Techniken verwandt ist [7]. Der resultierende Algorithmus

erlaubt nahezu alle Details der vollständigen Quantendynamik zu reproduzieren, siehe Abbildung 2.4 und 2.5.

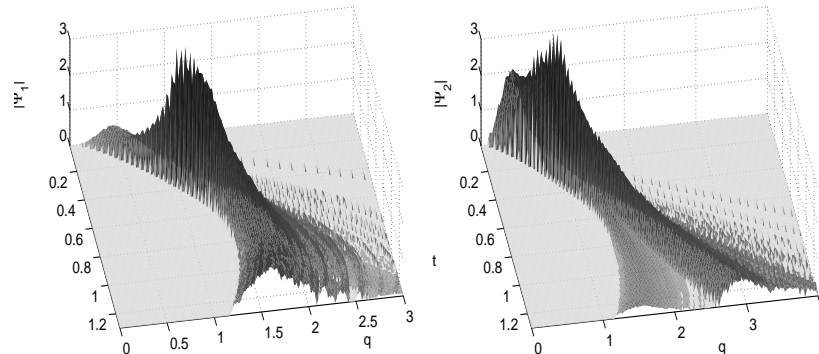


ABBILDUNG 2.5: Quanten–klassische Reproduktion des Wellenpakets aus Abbildung 2.4 unter Verwendung des auf QCMD beruhenden “surface hopping” Algorithmus (s. Text).

Allerdings gilt für diesen auf QCMD beruhenden “surface hopping” Algorithmus (wie für alle ähnlichen in der Literatur diskutierten Varianten des “surface hopping”), daß keine mathematisch fundierte Approximationstheorie existiert. Um in dieser Richtung voranzukommen, wurde am Ende des Berichtszeitraums eine neue quanten–klassische Grundgleichung abgeleitet, die im klassischen Teil des Systems nicht mehr eine einzelnen Trajektorie, sondern ein statistisches Ensemble verschieden stark angeregter Trajektorien beschreibt. Es bleibt zu diskutieren, ob diese Gleichung eine Deutung des entwickelten “surface hopping” Algorithmus als Partikelmethode und darauf aufbauend eine Beschreibung der Approximationsqualität erlaubt.

Effiziente Integriertoren für QCMD

Bearbeitet von: Peter Nettesheim, Christof Schütte

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

Parallel zu der im Berichtszeitraum durchgeführten Analyse der nicht–adiabatischen Effekte wurden die algorithmischen Anforderungen, die sich hieraus ableiten lassen, untersucht. Dabei tritt die Frage in den Vordergrund, wie der mit $\epsilon \rightarrow 0$ explodierende numerische Aufwand, der durch die hochoszillatorische Dynamik im quantenmechanischen Teilsystem verursacht wird, vermieden werden kann. Die quantendynamisch relevante Zeitskala hat die Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$, was zur Simulation in einem $\mathcal{O}(1)$ langen Zeitintervall $\mathcal{O}(1/\epsilon)$ –viele Integrations-schritte verlangt. Dies macht die Anwendung existierender Integriertoren, z.B. des für große ϵ effizient und verläßlich arbeitenden PICKABACK Algorithmus [4, 5], im Falle elektronischer Anwendungen nicht ratsam.

Aus diesem Grund ist es von herausragender Bedeutung, Integratoren zu entwickeln, die die punktweise Auflösung jeder einzelnen Oszillation umgehen und somit Zeitschrittweiten der Ordnung $\mathcal{O}(1)$, die durch das klassische Subsystem bestimmt sind, erlauben. Dazu wurde die bereits im Vorjahr entworfene Klassifizierung der Anwendungsprobleme [4] weiter verfeinert: Als Lang-Schritt-Verfahren für (a) *wesentlich nicht-adiabatischen* Quantenprozesse sind weiterhin die 1997 entwickelten "exponentiellen Integratoren" [4] empfehlenswert, während für (b) *fast adiabatische* Probleme von der bisherigen Konstruktionsstrategie für Integratoren abgewichen werden muß. Es scheint dabei unmöglich zu sein, die hochoszillatorische Phase zu reproduzieren, ohne die Schrittweite an dieselbe anzupassen. So wurde die Frage aufgeworfen, ob nicht wenigstens eine korrekte Wiedergabe der "wesentlichen" Dynamik, d.h. von klassischen Ort und Impuls sowie der quantenmechanischen Besetzungen, erreichbar ist. Dies wäre für die entwickelten Surface-Hopping Algorithmen ausreichend. Zu berücksichtigen ist dabei jedoch die verheerende Rückkopplung, die durch Fehler in der Phase bei den nichtlinear gekoppelten, anderen Variablen auftreten kann.

Anhand der sorgfältigen asymptotischen Analyse [3, 7] des QCMD-Modells zeigte sich, daß unter speziellen Bedingungen sogenannte "mittelnde Integratoren" in der Lage sind, die Dynamik unter Vermeidung eines $\mathcal{O}(1/\epsilon)$ -Fehlerwachstums korrekt wiederzugeben.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Die theoretischen Ergebnisse früherer Berichtszeiträume wurden in Zusammenarbeit mit Kooperationspartnern an realistischen Systemen getestet. Dies erforderte die Entwicklung und Modifikation größerer Programmpakete sowie anwendungsspezifische Anpassungen der numerischen Algorithmen. Gleichzeitig wurden auch 1998 wieder grundlegende Fragestellungen zur Integration der Schrödingergleichung behandelt.

Quanten-klassische Simulation einer Photodissoziation (Martin Holz, Peter Nettesheim, Christof Schütte, Johannes Schmidt-Ehrenberg)

In Kooperation mit B. Schmidt (Freie Universität Berlin, Fachbereich Chemie) wurde die Photodissoziation von HF in einem Argonkristall quanten-klassisch simuliert (vgl. Abbildung 2.6) [1]. Verwendet wurde ein Galerkin-Ansatz in symmetrieadaptierte Basisfunktionen. Dadurch konnten erstmals Aussagen über den Energietransport auf das Argongitter in Abhängigkeit vom quantenmechanischen Anfangszustand des Wasserstoffs getroffen werden. Algorithmisch zeigten sich deutlich die Vorteile "exponentieller Integratoren" [4]. Sie ermöglichten die Anpassung der Zeitschrittweite an die klassische Bewegung und ersparten somit viel Rechenaufwand bei der Auflösung der Quantendynamik. Die Ergebnisse der quanten-klassischen Simulation wurden mit Unterstützung neuentwickelter Komponenten des Visualisierungssystems AMIRA (siehe Projekt "Virtuelles RNA-

Labor") graphisch aufgearbeitet.

Dissipative Quantenmechanik (Wilhelm Huisinga)

In Zusammenarbeit mit L. Pesce, P. Saalfrank (beide Freie Universität Berlin) und R. Kosloff (Hebrew University Jerusalem, Israel) wurde das in 1997 begonnene Projekt zur Integration der Liouville–von Neumann–Gleichung offener Quantensysteme erfolgreich abgeschlossen [2]. Ausgehend von den Vorarbeiten wurden die Faber–Approximations– und die Newton–Interpolations–Techniken in optimierter Form in eine bestehende Programmumgebung implementiert, an physikalisch relevanten Beispielen getestet und verglichen. Wie bereits in 1997 theoretisch vorhergesagt, verhielten sich beide Integrationsverfahren weitestgehend identisch und erwiesen sich als effizient, stabil sowie allgemein anwendbar. Jedoch ist die Faber–Approximation aufgrund besserer analytischer Eigenschaften und einfacherer Implementierung zu favorisieren. Dies erlaubte — im Gegensatz zur Newton–Interpolation — die Berechnung von Absorptionsspektren in kondensierter Phase, deren Ergebnisse in sehr guter Übereinstimmung mit semi-analytischen Ausdrücken stehen [2].

Adaptive Konzepte für die zeitabhängige Schrödingergleichung und Phasenraummethoden (Lin Zschiedrich, Christof Schütte, Frank Schmidt, Peter Deuffhard)

Die zeitabhängige Schrödingergleichung besitzt Struktur- und Erhaltungseigenschaften, so ist sie norm- und energierhaltend und symplektisch. Daher wurde das Augenmerk auf die Vererbung dieser Eigenschaften durch die Zeitdiskretisierung gerichtet, in der Hoffnung hierdurch größere Zeitschritte machen zu können. Es zeigte sich aber, daß zahlreiche (symplektische) Integratoren die Dispersionrelation verzerren und somit Wellenpakete mit falscher Gruppengeschwindigkeit propagieren. Ein Ansatzpunkt, dieses zu umgehen, war die Zerlegung der Wellenfunktion mit Hilfe einer Wavelettransformation in Pakete mit einer kleineren Unschärfe im Phasenraum, was dann eine Impulszentrierung für jedes einzelne Wellenpaket erlaubt. Es stellte sich allerdings heraus, daß nach der Wavelettransformation die negativen und positiven Wellenzahlen nicht unterscheidbar sind. Weiterhin wurden die ersten Schritte in Richtung einer Partikelmethode im Phasenraum auf Basis der Wignertransformierten der Wellenfunktion unternommen.

Publikationen

- [1] M. Holz, *Quanten–klassische Simulation der Photodissoziation von HF in einer Argon–Matrix*, Diplomarbeit, Fachbereich Chemie der FU Berlin und ZIB, Berlin, 1998.
- [2] W. Huisinga, L. Pesce, R. Kosloff and P. Saalfrank, *Faber and Newton Polynomial Integrators for Open–System Density Matrix Propagation*, Preprint SC 98–29, ZIB, 1998 (accepted for publication in Journal of Chemical Physics).

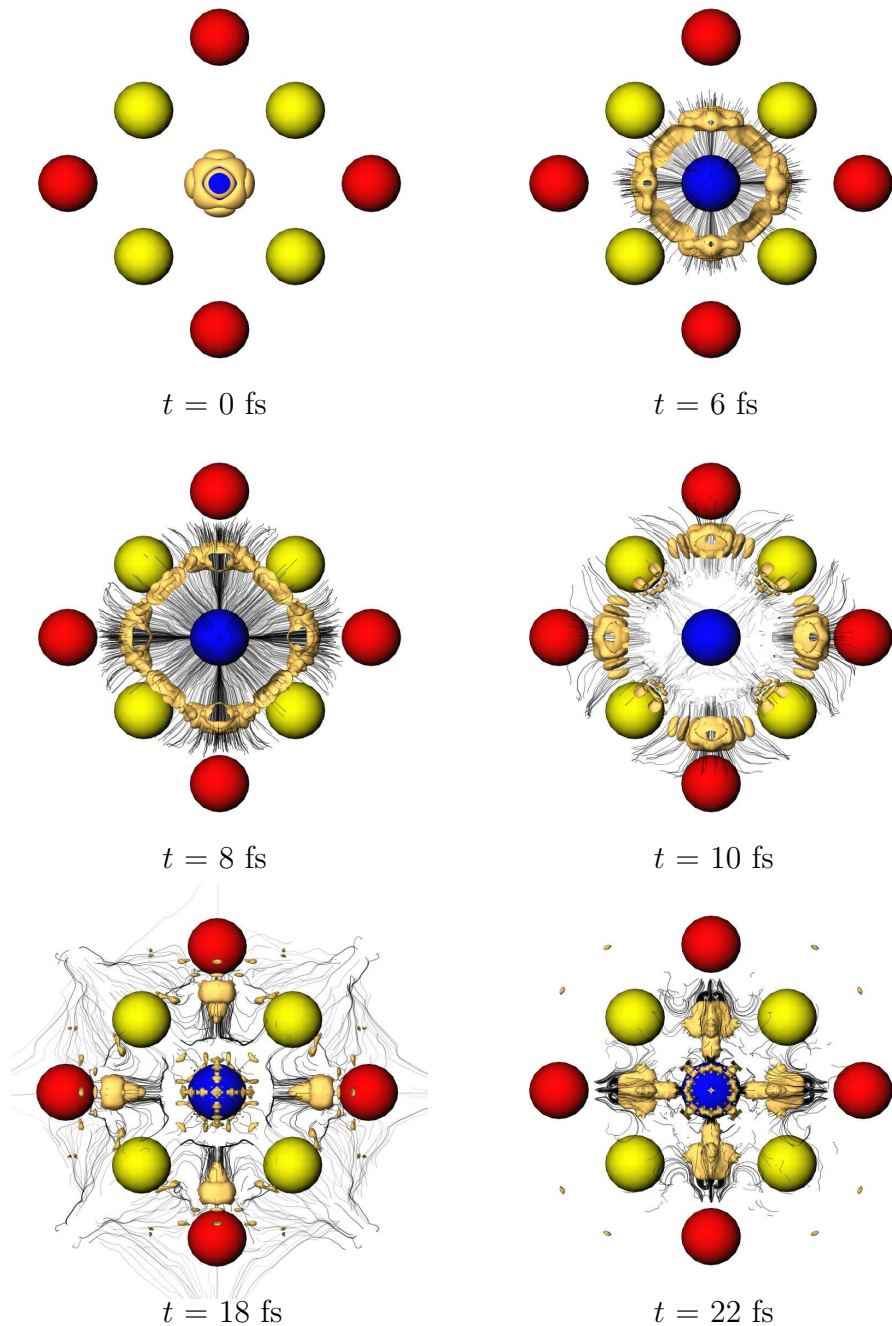


ABBILDUNG 2.6: Quanten–klassisch modellierte Photodissoziation von HF in einem Argonkristall. Quantenmechanischer Anfangszustand des Wasserstoffs zu $t = 0$ ist der Eigenzustand zur Drehimpulsquantenzahl $j = 4$. Zu beachten ist, daß durch die besondere räumliche Ausrichtung dieses Anfangszustandes ein Käfigeffekt nicht an der ersten Argonschale ($t = 8$ fs) sondern an der zweiten Schale ($t = 18$ fs) auftritt. Somit können Aussagen über die Dynamik unterschiedlicher quantenmechanischer Anfangsbesetzungen betrachtet werden, was bei rein klassischen Simulationsmodellen nicht möglich ist.

- [3] P. Nettesheim, *Second Order Transitions in Quantum–Classical Molecular Dynamics*, Preprint SC 98–37, ZIB, 1998.
- [4] P. Nettesheim, Ch. Schütte, *Numerical Integrators for Quantum–Classical Molecular Dynamics*, in: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, Vol. 4, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 396–411 (1998)
- [5] P. Nettesheim, S. Reich, *Symplectic Multiple-Time-Stepping Integrators for Quantum–Classical Molecular Dynamics*, in: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, Vol. 4, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 412–420 (1998)
- [6] Ch. Schütte, F. A. Bornemann, *Approximation Properties and Limits of the Quantum–Classical Molecular Dynamics Model*, in: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, Vol. 4, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 380–395 (1998)
- [7] Ch. Schütte, P. Nettesheim, *Non–Adiabatic Effects in Quantum–Classical Molecular Dynamics*, Preprint SC 98–38, ZIB, 1998.

2.2.3 Adaptive Multilevel-FEM

Nichtlineare parabolische PDE Systeme

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch

Die Beschreibung der Dynamik von physikalischen Prozessen führt häufig auf nichtlineare Systeme von parabolischen Differentialgleichungen. Obwohl das Lösungsverhalten derartiger Probleme einen aktuellen Forschungsgegenstand moderner Analysis darstellt, ist die numerische Simulation solcher komplexer Systeme immer noch das Hauptwerkzeug, um Aussagen über die Qualität der benutzten Modelle zu erhalten. Ganz wesentlich ist hier eine fehlerkontrollierte numerische Lösung, die es erlaubt, Modellierungseffekte und numerische Effekte zu trennen und zu beurteilen.

Im Berichtszeitraum wurde eine umfassende Monographie [3] erstellt, in welcher unter anderem ein grundlegendes Konzept zur analytischen Untersuchung bereits am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelter und implementierter Algorithmen ausgearbeitet wurde. Als Diskretisierungen für die zeitabhängigen parabolischen Systeme werden linear implizite Methoden vom Rosenbrock-Typ in der Zeit und multilevel Finite Elemente im Raum benutzt. Diese Kombination hatte sich bereits bei Teilklassen, z.B. Reaktions-Diffusions-Systemen und inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen, bewährt. Einen Schwerpunkt stellt

die Analyse von adaptiven Techniken dar, die auf effizienten und robusten a posteriori Fehlerschätzern basieren. Sie bilden den Schlüssel für eine zuverlässige numerische Simulation von praxisrelevanten Problemen. Für die Beurteilung der numerischen Lösungen werden lokal verbesserte Approximationen in Zeit und Raum konstruiert, die in ihrem Berechnungsaufwand den Aufwand des Grundalgorithmus nicht überschreiten. Als grundlegende Konzepte werden Einbettung in der Zeit und speziell konstruierte hierarchische Basen im Ort verwendet. Diese Schätzer arbeiten ohne physikalisches Hintergrundwissen und sind daher nicht abhängig von speziellen Problem-Voraussetzungen.

Die theoretischen Untersuchungen führten zu einem verbesserten Verständnis der verwendeten Rosenbrock-Verfahren. Im Ergebnis wurden verschiedene Zeitintegratoren im Programmpaket KARDOS realisiert, die einen flexibleren Einsatz des gesamten adaptiven Algorithmus erlauben.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Gebietszerlegung mit CCG auf homogenen Teilgebieten (Peter Deuffhard, in Kooperation mit D. Braess, Bochum, K. Lipnikov (Moskau, Rußland – Gast am ZIB))

Im Berichtszeitraum wurde das bereits in 1997 begonnene DD/CCG-Projekt fortgeführt. Bisher waren die auftretenden Sattelpunktsprobleme mit indefiniten iterativen Lösern behandelt worden, wodurch sich gegenüber KASKADE/BPX keine algorithmische Verbesserung ergab. In 1998 wurde nun eine speziell auf die Struktur des „Mörtelproblems“ bei Materialsprüngen zugeschnittene Unterraumiteration konstruiert: In dem gewählten Unterraum ist das Problem sodann definit. Dieses Vorgehen ähnelt dem Vorgehen beim inkompressiblen Stokes-Problem. Eine befriedigende Konvergenztheorie konnte auch für den adaptiven Fall herausgearbeitet werden. In ersten numerischen Tests an Problemen mit signifikanten Materialsprüngen (in 2D) ergab sich diesmal eine echte Verbesserung gegenüber dem KASKADE/BPX-Algorithmus, auch im adaptiven Kontext. Die Übertragung auf die medizinischen Probleme in der Hyperthermie steht bevor.

Publikationen

- [1] D. Braess, P. Deuffhard, und K. Lipnikov, *An Adaptive DD/CCG Method on Non-Matching Grids*, Preprint SC 99-07, ZIB, 1999 (in Vorbereitung).
- [2] P. Deuffhard und K. Lipnikov, *Domain decomposition with subdomain CCG for material jump elliptic problems*, East-West J. Numer. Math. **6** (1998), 81–100.
- [3] J. Lang, *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems. Theory, Algorithm, and Applications*, Habilitationsschrift, eingereicht am

Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin, 1999.

2.2.4 Hochfrequente Elektrotechnik

Die bereits in den Vorjahren im Mittelpunkt stehenden Projekte zur Lösung der zeitharmonischen Maxwell'schen Gleichungen mit Anwendungen in der Krebstherapie und Integrierten Optik wurden weiter vorangetrieben. Die Arbeiten zu den Eigenlösungen der skalaren Helmholtzgleichung konnten abgeschlossen werden. Als substantielle Erweiterung dieses Problemfeldes wurde die Entwicklung von adaptiven Multilevelverfahren zur Berechnung von Eigenlösungen der Maxwell'schen Gleichungen in das Arbeitsprogramm aufgenommen.

Eigenlösungen von verlustbehafteten optischen Komponenten

Bearbeitet von: Tilmann 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.

Das Projekt beinhaltet die Berechnung der ausbreitungsfähigen Eigenmoden integriert-optischer Wellenleiter, wie sie z.B. durch die Kopplerstruktur in Abbildung 2.7 gegeben sind. Hier bezeichnet das graue Gebiet InP, das schwarze GaInAsP. Im ersten Schwerpunkt dieses Projektes wurde eine geeignete mathematische Fassung des Eigenwertproblems erarbeitet. Von der Vielzahl der zur Verfügung stehenden Methoden wurde ein direkter Zugang basierend auf einer Formulierung des Eigenwertproblems für das magnetische Feld gewählt, was insbesondere für die in der Integrierten Optik eingesetzten unmagnetischen Materialien von Vorteil ist. Des weiteren liefert der Ansatz die Eigenmoden und die zugehörigen Ausbreitungskonstanten für Wellenleiter in direkter Weise, ohne die sonst auch übliche indirekte Bestimmung über das Eigenwertproblem bzgl. der Wellenzahlen.

Die gefundene Variationsformulierung besteht aus zwei miteinander gekoppelten Variationsgleichungen, einer vektoriellen Gleichung für den transversalen, und einer skalaren für den longitudinalen Anteil des magnetischen Feldes. Die Divergenzbedingungen der Maxwell'schen Gleichungen sind in dieser Beschreibung automatisch erfüllt. Die Diskretisierung des transversalen Anteils mit zweidimensionalen Kantenelementen und des longitudinalen Anteils mit üblichen Lagrange-Knotenelementen führt auf ein algebraisches Eigenwertproblem mit Nebenbedingung. Diese Nebenbedingung, die als diskrete Divergenzbedingung interpretiert werden kann, verhindert eine direkte Umsetzung der in den Vorgängerprojekten betriebenen Strategie einer Rayleigh-Quotienten-Minimierung. Deshalb wurde als eine für die Praxis geeignete Methode zunächst ein modifiziertes Block-Arnoldi-Verfahren entwickelt. In diesem Verfahren wird die Nebenbedingung im Initiali-

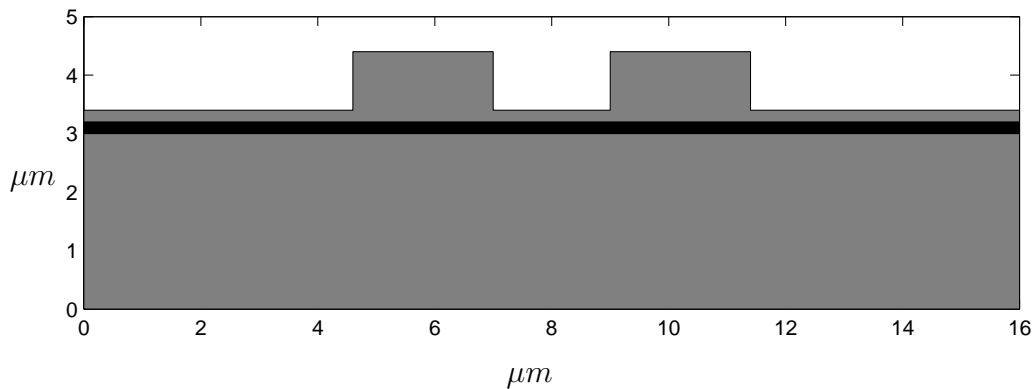


ABBILDUNG 2.7: Querschnitt eines integriert-optischen Kopplers.

sierungsschritt mitverarbeitet und taucht sonst nicht mehr auf.

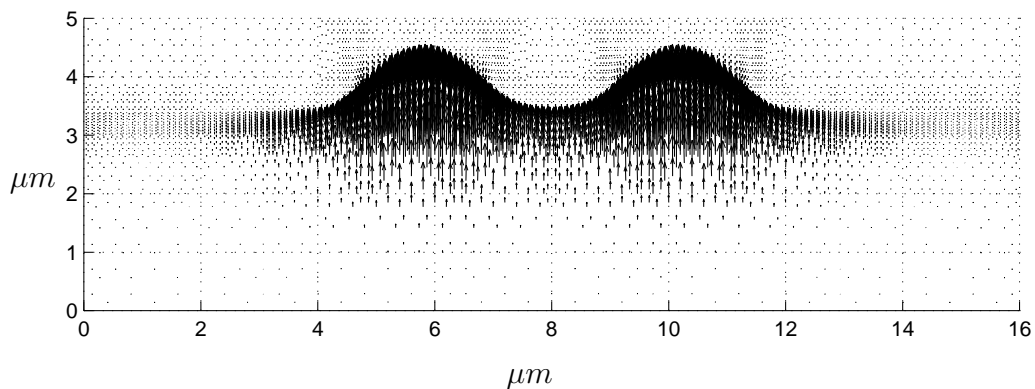


ABBILDUNG 2.8: Transversaler Anteil des Magnetfeldes der Eigenfunktion \mathbf{u}_1 .

Der mit dem entwickelten Verfahren berechnete transversale und longitudinale Anteil der Grundmoden ist in den Abbildungen 2.8 bzw. 2.9 dargestellt. Neben den Eigenwerten ist für den Chip-Designer vor allem das Auftreten singulärer Feldstärkewerte von Interesse, wie sie an den Kanten des Rippenwellenleiters in Abbildung 2.9 deutlich sichtbar sind.

Diskrete transparente Randbedingungen für die Helmholtzgleichung

Bearbeitet von: Frank Schmidt

Das Projekt ist eine Fortsetzung der im Vorjahr durchgeführten Arbeiten. Im Berichtszeitraum standen ein besseres theoretisches Verständnis der entwickelten

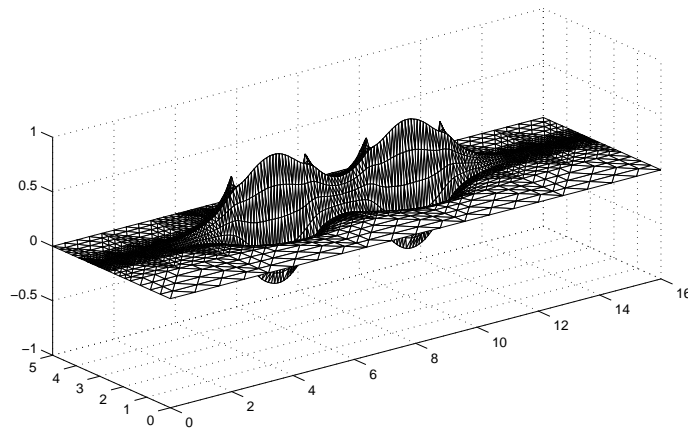


ABBILDUNG 2.9: Longitudinaler Anteil der zur Grundmode gehörenden magnetischen Feldstärke.

Methode und darauf aufbauend die Konstruktion verschiedener Klassen approximativer diskreter transparenter Randbedingungen im Vordergrund.

Als Vergleichsmethoden wurden die Infinite-Elemente-Methode, Randelement-Methoden bzw. daraus konstruierte Poincaré-Steklov-Operatoren und die aus Separationsansätzen resultierenden Dirichlet-to-Neumann-Operatoren analysiert. Es konnte gezeigt werden, daß der im Vorjahr konstruierte diskrete Randoperator eine diskrete Version eines Poincaré-Steklov-Operators ist, wobei die Fundamentallösung automatisch im Verfahren mitkonstruiert wird und deshalb nicht a priori bekannt sein muß. Im speziellen Fall eines separablen Koordinatensystems stimmt der untersuchte Randoperator mit dem für homogene Medien bekannten DtN-Operator überein. Darüber hinaus kann der diskrete Randoperator als Verallgemeinerung dieser Operatoren aufgefaßt werden, da sich mit ihm auch eine große Klasse inhomogener Außenraumprobleme in natürlicher Weise behandeln läßt. Solche Inhomogenitäten treten in Anwendungen immer dann auf, wenn optische Felder durch Wellenleiter transportiert werden.

Im Berichtszeitraum wurde mit der Entwicklung zweier allgemeiner Klassen zur numerischen Realisierung des Randoperators begonnen. Die erste Klasse baut auf den bereits in den Vorjahren entwickelten asymptotischen Approximationen auf und liefert, wenn die physikalische Situation eine asymptotische Behandlung zuläßt, eine effiziente Implementierung des Operators. Die zweite Klasse, deren Entwicklung erst am Anfang steht, berechnet den allgemeinen Randoperator über eine Projektion in einen nahezu invarianten niedrigdimensionalen Teilraum, wobei Löser für gewöhnliche Differentialgleichungen eingesetzt werden.

Als Beispiel für die Anwendung einer asymptotischen Randbedingung zeigt Abbildung 2.10 die Reflexion eines Gaußstrahls an einem Metallgitter.

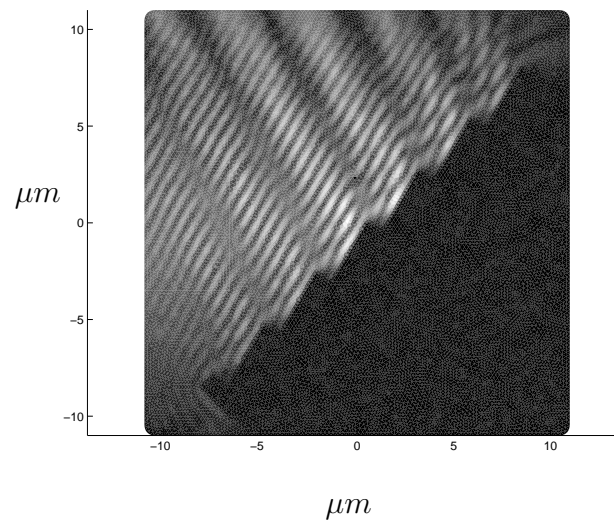


ABBILDUNG 2.10: Reflexion eines Gaußstrahles an einem Metallgitter

Publikationen

- [1] F. Schmidt. An Alternative Derivation of the Exact DtN-Map on a Circle. Preprint SC 98-32, ZIB, 1998.
- [2] T. Friese. Eine Mehrgitter-Methode zur Lösung des Eigenwertproblems der komplexen Helmholtzgleichung. Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin, 1998.

2.2.5 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.

Effiziente Simulation von Kombinationsreaktoren

Bearbeitet von: Rainald Ehrig, Jens Lang, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard,

Kooperationspartner: R. Adler, M. Schreier, M. Bauer, Th. Hennig

(Institut für Bioverfahrenstechnik und Reaktionstechnik, Universität Halle-Wittenberg)

Die im Jahr 1997 begonnene Kooperation wurde im Berichtszeitraum intensiviert. 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 für zwei einzelne Reaktorbausteine Modelle mit unterschiedlichen Zielrichtungen entwickelt und mittels ausgedehnter Simulationsrechnungen untersucht.

Bei der ersten Untersuchung stand die detaillierte Modellierung und Simulation der Wärmeausbreitung in einem gekühlten Reaktorschuß im Vordergrund. Aufgrund der geometrischen Komplexität dieses räumlich zweidimensionalen, zeitabhängigen Modells wurden die Simulationsrechnungen mit dem Programmpaket KARDOS durchgeführt.

Die andere Untersuchung hatte zum Ziel, die Vorgänge an und in den Katalysatorkörnern der Schüttung detailliert zu beschreiben. Dies wurde durch eine Modellierung mit einer eindimensionalen partiellen Differentialgleichung längs des Katalysatorradius erreicht, die an der Katalysatoroberfläche mit dem Rest des Systems in Wechselwirkung tritt. Bei der Betrachtung der räumlichen Effekte im Reaktor selbst wurden dagegen zunächst stark vereinfachende Annahmen ge-

macht. So wurde nur eine Raumkoordinate (Längsachse des Rohrs) betrachtet. Zur numerischen Lösung dieses Modells wurde eine klassische Linienmethode in Verbindung mit dem Zeitintegrator LIMEX verwendet. Da die auftretenden Jacobimatrizen eine noch moderate Größe aufweisen, konnte das neu entwickelte Softwarepaket LIMEX4.0a (mit Bandmodus) erfolgreich verwendet werden. Dabei bewies sich insbesondere das neue Modul zur Berechnung konsistenter Startwerte als sehr effizient und robust.

Das langfristige Ziel der Kooperation, die robuste Parameterschätzung bzw. Bestimmung, soll mit Hilfe der im Hause entwickelten Gauß–Newton–Techniken erreicht werden. Diese Methoden erlauben insbesondere numerisch fundierte Aussagen über die Identifizierbarkeit von Modellparametern. Um dieses Ziel zu erreichen, wurde in einem ersten Schritt der in der CodeLib–Software NLS–CON implementierte Algorithmus um die Möglichkeit erweitert, auch nichtlineare Ungleichungs–Nebenbedingungen zu behandeln. Des Weiteren wurde mit der softwaretechnischen Erweiterung der Basissoftware begonnen. Das Verfahren soll nicht nur für explizit gegebene nichtlineare Modellfunktionen eingesetzt werden, sondern auch in Verbindung mit implizit gegebenen nichtlinearen Modellen, gewöhnlichen Differentialgleichungsmodellen und letztendlich auch in komplexen partiellen Differentialgleichungsmodellen. Die in 1998 beantragte Projektförderung wurde Anfang 1999 durch die DFG benehmigt.

Aerosolsimulation

Bearbeitet von: Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard

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

Förderung: DFG, Projekt: “Modellierung und Simulation der Bildung und des Verhaltens von Aerosolen in mehrstufigen Absorptions- und Kondensationsprozessen”

Im abgelaufenen Jahr wurden die algorithmischen Verbesserungen und die damit erzielten drastischen Verkürzungen der Rechenzeit genutzt, um zahlreiche realistische Simulationen, etwa für verschiedene Auslegungen von Rauchgaswaschanlagen, durchzuführen. Sowohl die sequentiellen als auch die parallelen Implementierungen ermöglichen eine große Zahl von Tropfenklassen und damit eine genaue Analyse der mehrdimensionalen Populationsverteilung als auch die Simulation größerer verschalteter Anlagen.

Die auf diese Weise gewonnenen Kenntnisse sollen nun eingesetzt werden, um auf der Basis von Galerkin–Verfahren neue algorithmische Methoden zu entwickeln, die alle bei Aerosolbildung, –wachstum und –zerfall relevanten Prozesse beschreiben, ohne eine künstliche Einteilung in Klassen vorzunehmen. Ein diesbezüglicher gemeinsam mit dem ITTK gestellter Antrag an die DFG wurde zum 01. November 1998 genehmigt.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Simulation detaillierter Chemiemodelle in AIOLOS (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard)

Neu begonnen wurde eine Kooperation mit dem Institut für Verfahrenstechnik und Dampfkesselwesen der Universität Stuttgart (D. Foertsch, K. Hein). Ziel dieser Zusammenarbeit ist im ersten Schritt der Einsatz von linear-impliziten Extrapolationsverfahren im Programmpaket AIOLOS, das zur numerischen Simulation turbulenter reaktiver Strömungen insbesondere in Feuerungsanlagen dient. Die Beschreibung der chemischen Reaktionen in den turbulenten Strömungen wird hierbei innerhalb des "Eddy Dissipation Concept" vorgenommen. Dieses Modell führt zu einem Satz steifer gewöhnlicher Differentialgleichungen bzw. differentiell-algebraischer Gleichungen, dem PSR-Gleichungssystem (Perfectly Stirred Reactor), das in jedem Volumenelement der CFD-Diskretisierung (ca. 500.000) gelöst werden muß. Daher ist die Effizienz des Lösungsverfahrens für das Gesamtprogramm von entscheidender Bedeutung, insbesondere wenn detaillierte Reaktionsmechanismen verwendet werden sollen. Erste Ergebnisse, die die Robustheit und Zuverlässigkeit von Extrapolationsverfahren für diese Problemklasse belegen, wurden bereits erzielt.

Weitere Simulationsanwendungen (Rainald Ehrig, Bodo Erdmann, Jens Lang, Ulrich Nowak, Rainer Roitzsch)

Die Zusammenarbeit mit der Universität Lissabon, Centro de Ciência e Tecnologia de Materiais (M.J. Lourenço, C.A. Niete de Castro) wurde fortgesetzt. In dieser Kooperation wird KARDOS eingesetzt, um die thermische Leitfähigkeit von Materialien im hochoberflächigen, flüssigen Zustand zu simulieren.

Auch die Kooperation mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart (G. Eigenberger, J. Frauhammer) im Rahmen der Weiterentwicklung von PDEX1M und PDEXPACK wurde kontinuierlich fortgeführt.

Publikationen

- [1] M. Bauer, M. Schreier, U. Nowak, R. Adler, *Beitrag zur mathematischen Modellierung des heterogen-gaskatalytischen Rohrreaktors mit einem Zweiphasenmodell*, Chem. Techn. **50** (1998), 169–176.
- [2] R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard, *Massively Parallel Simulations in Chemical Engineering by Extrapolation Algorithms*, in *Proceedings of the 6th International Workshop on Distributed Data Processing Novosibirsk*, V.G. Khoroshevsky ed., RAS Siberian Branch Publisher, 1998, 1–6.
- [3] R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard, *Massively Parallel Linearly-Implicit Extrapolation Algorithms as a Powerful Tool in Process Simulation*,

- in *Parallel Computing: Fundamentals, Applications and New Directions*, E.H. D'Hollander, G.R. Joubert, F.J. Peters, U. Trottenberg eds., 1998, 517–524.
- [4] J. Frauhammer, H. Klein, G. Eigenberger, U. Nowak, *Solving moving boundary problems with an adaptive moving grid method: Rotary heat exchangers with condensation and evaporation*, Chem. Eng. Sci. **53** (1998), 3393–3411.
- [5] J. Körber, K. Schaber, R. Ehrig, P. Deuffhard, *Modelling and simulation of aerosol formation in absorption processes*, J. Aerosol Sci. **29** (1998), 579–580.
- [6] U. Nowak, R. Ehrig, L. Oeverdieck, *Parallel Extrapolation Methods and Their Application in Chemical Engineering*, in *High-Performance Computing and Networking. Lecture Notes in Computer Science Vol. 1401*, P. Sloot, M. Bubak, B. Hertzberger eds., 1998, 419–428.

2.2.6 Medizinische Planungssysteme

Im Zentrum der Aktivitäten stand weiterhin das Thema *regionale 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.

Dazu traten einige neue Projekte mit medizinischer Ausrichtung. Diese umfassen die optimale Positionierung von Thermoseeds, die Planung der robotergestützten Implantation von Ohr-Epithesen sowie Simulationsrechnungen zur Durchleuchtung des Gewebes mit Infrarot-Laserstrahlen, einer möglichen Alternative zur Mammographie.

Generierung von anatomisch getreuen Gittermodellen

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

Kooperationspartner: Peter Wust, Johanna Gellerman (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin), Jens Gustedt, Konrad Polthier (Fachbereich Mathematik, TU Berlin)

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik und Klinik“ DFG, Graduiertenkolleg „Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik“

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. Konkret besteht die Gittergenerierung aus folgenden Schritten:

- Segmentierung der Bilddaten, d.h. Abgrenzung der verschiedenen Gewebekompartimente in einem Satz von Schnittbildern,

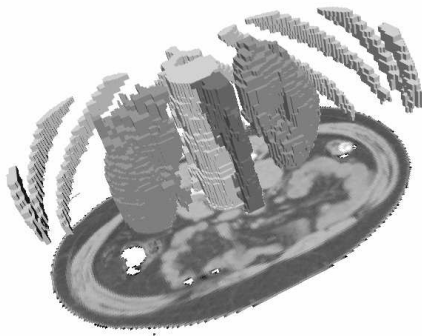


ABBILDUNG 2.11: Voxeldarstellung einiger mit dem Region-Merging-Verfahren automatisch segmentierter Regionen im Unterleibsbereich. Zu erkennen sind sieben Rippen, die Wirbelsäule, die Aorta und die Nieren.

- Extraktion der Gewebe-Grenzflächen und
- Ausfüllen der Grenzflächen durch ein Volumengitter.

SEGMENTIERUNG. Derzeit ist die Segmentierung ein interaktiv gesteuerter Arbeitsschritt, der oft einen großen Teil des Gesamt-Zeitaufwands für die Planung einer medizinischen Behandlung ausmacht. Im Berichtszeitraum wurden zwei neue Ansätze untersucht, die Segmentierung durch semi-automatische Verfahren für den Anwender zu vereinfachen und zu beschleunigen.

Das bekannte schichtbasierte zweidimensionale *Snakes*-Verfahren, in dem eine geschlossene 2D-Kontur unter der Einwirkung von Kräften an den Rändern des Objektes „einschnappt“, wurde durch Einführung von 3D-Kräften erweitert. Mit ihrer Hilfe kann man trotz unter Umständen fehlender Bildinformation gute Segmentierungsergebnisse in den einzelnen Schichten erhalten, da auch die Bilddaten benachbarter Schichten in die Berechnung eingehen. Die initiale Kontur spielt eine entscheidende Rolle für das Segmentierungsergebnis in einer Schicht. Für den Benutzer ist es sehr zeitaufwendig, initiale Konturen manuell einzuzeichnen. Es wurden deshalb Verfahren zur automatischen Generierung von initialen Konturen entwickelt.

Ein direkter 3-dimensionaler Ansatz wurde mittels eines *Region-Merging*-Verfahrens verfolgt. Benachbarte Voxel des Volumendatensatzes werden iterativ aufgrund von Ähnlichkeitsmaßen zu immer größeren Regionen zusammengefaßt. Zu Beginn stellt jedes Voxel eine eigene Region dar. Neben statistischen Ähnlichkeitsmaßen wurden auch einfache geometrische Maße verwendet, um ein unerwünschtes Zusammenlaufen, den sogenannten Chaining-Effekt, zu vermindern. Nach Beendigung des Region-Merging-Verfahrens können Teilregionen von untersegmentierten Objekten durch einfache Mausklicks zu den gesuchten Objekten zusammengefügt werden.

Ein weiteres Problem bei der Segmentierung ist die Art und Weise, wie Segmentierungsergebnisse gespeichert werden. Viele Verfahren, insbesondere 3D-Algorithmen, liefern keine Konturen, sondern arbeiten voxel-basiert. Es

konnte gezeigt werden, daß die Genauigkeit einer voxel-basierten Darstellung durch Einführung geeigneter Gewichte signifikant verbessert werden kann. Standardverfahren zur interaktiven Segmentierung wurden so erweitert, daß neben den Regionenlabels die zugehörigen Gewichte konsistent modifiziert werden können [7].

QUALITÄTSVERBESSERUNG FÜR VOLUMENGITTER. Im Rahmen der Modellgenerierung wird ein Advancing-Front-Verfahren eingesetzt, um zu gegebenen Gewebe-Grenzflächen ein Tetraeder-Volumengitter zu erzeugen (siehe Jahresbericht 1995). Bei diesem Verfahren kann zwar eine Mindestqualität der Tetraeder vorgegeben werden, es wird aber nicht unbedingt ein Gitter mit optimaler Qualität generiert. Im Berichtszeitraum wurden Methoden untersucht, die Gitterqualität im nachhinein durch lokale Transformationen weiter zu verbessern. Als Maß für die Tetraeder-Qualität dient das Verhältnis der Radien von umschreibender und einbeschriebener Kugel. Abbildung 2.12 zeigt eine Klassifikation pathologischer Tetraeder nach [BERN/EPPSTEIN]. Folgende Transformationen erwiesen sich als besonders wirkungsvoll:

- Verschieben von inneren Vertices des Gitters, so daß die Qualität der angrenzenden Tetraeder optimal wird.
- Lokales Rekonfigurieren, bei dem innere Dreiecke oder Kanten des Gitters entfernt werden.

Die besten Ergebnisse werden erzielt, wenn man beide Operationen mehrfach im Wechsel anwendet. Für ein typisches Patientenmodell (50 000 Tetraeder) sind 4 Durchläufe beider Operationen ausreichend; dafür werden ca. 2 Minuten CPU-Zeit benötigt.

Es wurde weiter untersucht, wie sich die Verbesserung der Gitterqualität auf die numerischen Berechnungen auswirkt, die auf den Gittern ausgeführt werden. Bei der Simulation elektromagnetischer Felder für die regionale Hyperthermie mittels der Finite-Elemente-Methode ergibt sich, daß das iterative Lösungsverfahren um ca. 10% schneller konvergiert. Damit wird der zusätzliche Zeitaufwand für die Verbesserung der Gitterqualität schon bei der Rechnung auf dem Grundgitter wieder wettgemacht. Auch der geschätzte Diskretisierungsfehler verkleinert sich um ca. 10%.

DEFORMIERBARE MODELLE. Im Rahmen des Graduiertenkollegs „Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik“ wurde das Thema *deformierbare anatomische Modelle* bearbeitet. Für eine Reihe von Probanden wurden mittels Magnetresonanz-Tomographie (MR) Aufnahmen bei jeweils zwei verschiedenen Arten der Lagerung erzeugt:

- Lagerung auf der flachen Liege des Tomographen, von der bisher bei der Behandlungsplanung ausgegangen wird.

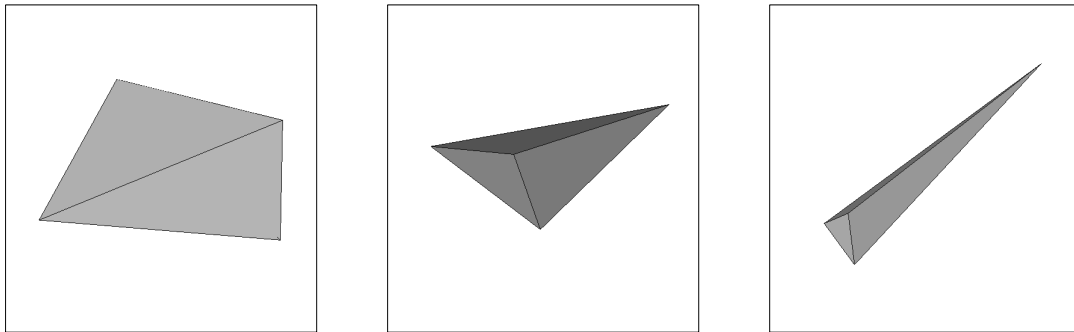


ABBILDUNG 2.12: Klassifikation pathologischer Tetraeder: Sliver (4 Vertices fast koplanar), Cap (ein Vertex dicht über einem Dreieck) und Needle.

- Durch Vakuumpkissen simulierte Lagerung in einer „Hängematte“, die der Situation bei einer regionalen Hyperthermie-Behandlung entspricht.

MR-Aufnahmen, die die Lagerung während der Behandlung zeigen, werden in Zukunft durch ein kombiniertes Hyperthermie-MR-Gerät verfügbar sein.

Im Vordergrund stand zunächst die Aufgabe, ein gegebenes Patientenmodell möglichst schnell an die aktuelle Lagerung anzupassen. Dafür kommen nur Informationen in Frage, die mit einfachen Methoden aus den MR-Daten gewonnen werden können. Dazu zählen einerseits die Lage von Becken- und Oberschenkelknochen, da sich die Knochen nur als starre Körper bewegen können. Durch ein „Warping“ des Patientenmodells wurde die Deformation des Weichteilgewebes nachgebildet, die der Knochenbewegung entspricht. Auch die Körperoberfläche läßt sich aus den Bilddaten schnell bestimmen. Mit Hilfe der zugehörigen „distance map“ wurde eine geeignete Deformation der Oberfläche des Patientenmodells bestimmt.

Entwurf und Beurteilung neuer Applikatoren der regionalen Hyperthermie

Bearbeitet von: Rudolf Beck, Jacek Nadobny, Martin Seebaß, Peter Deuffhard
Kooperationspartner: Horst Fähling, Peter Wust (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin), Jörn Berger, Waldemar Wlodarczyk (TU Berlin, FB Elektrotechnik), BSD Medical Corporation, Salt Lake City, USA
Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik und Klinik“

Eine wichtige technische Komponente bei der regionalen Radiowellen-Hyperthermie ist das Antennen-Aggregat des Applikators. Um eine therapeutisch sinnvolle Temperaturverteilung im Patientenkörper zu erzeugen, müssen die Einzelfelder der Antennen in geeigneter Weise überlagert werden. Typ, Form und Anzahl der Antennen spielen dabei eine erhebliche Rolle. Die Forschungsarbeiten zu diesem Thema umfaßten die Bewertung eines neuen kommerziellen Applikators

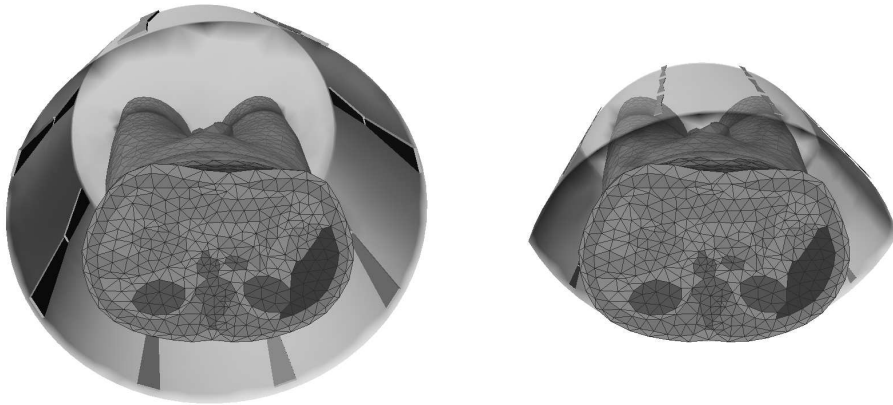


ABBILDUNG 2.13: Alter und neuer Applikator (links und rechts).

mit vergrößerter Antennenzahl sowie Simulationsrechnungen zum Entwurf von Antennen mit verbesserten Abstrahl-Eigenschaften.

BEWERTUNG EINES NEUEN KOMMERZIELLEN APPLIKATORS. Anfang 1998 wurde von der Firma *BSD Medical Corporation* ein neues Gerät für die regionale Hyperthermie eingeführt, der sogenannte *Sigma-Eye*-Applikator. Während der bisherige Applikator vier Antennenpaare enthielt, können bei dem neuen zwölf Antennenpaare unabhängig angesteuert werden. Diese sind in drei parallelen Ringen angeordnet und ermöglichen dadurch eine Steuerung der Leistungsverteilung auch in Richtung der Patientenachse. Eine weitere Neuerung ist der „augenförmige“ Querschnitt des Applikators. Zwischen Antennenring und Patient befindet sich ein mit Kühlwasser gefüllter Plastiksack. Dieser hat beim neuen Applikator ein deutlich kleineres Volumen (siehe Abbildung 2.13).

Für drei Patienten mit typischen Tumorlagen wurde anhand von Simulationsrechnungen ein Vergleich von altem und neuem Applikator durchgeführt [1, 5]. Wie Tabelle 2.1 zeigt, kann mit letzterem in allen Fällen die Erwärmung des Tumors deutlich verbessert werden. Gleichzeitig können lokale Überwärmungen („hot spots“) im gesunden Gewebe in manchen Fällen reduziert werden.

ENTWICKLUNG MAGNETISCHER ANTENNEN. Bisherige Betrachtungen beschränkten sich auf Systeme mit elektrischen Dipolstrahlern, wie zum Beispiel bei den Applikatoren der Firma BSD. Nachteilig sind hier stark gekrümmte elektrische Felder nahe bei den Enden der Dipol-Schenkel. Sie führen oft zu großen Normalfeld-Komponenten an der Körperoberfläche eines Patienten. Aufgrund der dielektrischen Eigenschaften des oberflächennahen Fettgewebes und des anliegenden Kühlwasserrings sind hohe Felder in Fett und Muskulatur die Folge, was zu „hot spots“ führen kann.

	Anteil des Tumolvolumens, der über 43°C erwärmt wird	
	Sigma-60 (alt)	Sigma-Eye (neu)
distal gelegenes Rektalkarzinom	17.5%	62.5%
präsakrales Rektalkarzinom	0.7%	18.4%
Beckenwand-Rezidiv eines Zervixkarzinoms	24.8%	49.1%

Tabelle 2.1: Vergleich von altem und neuem Applikator für drei Patienten mit verschiedenen Tumortypen.

Aus diesem Grund wurden an dem Berliner Rudolf-Virchow-Klinikum auch Aggregate mit magnetischen Dipol-Antennen konstruiert. Letztere bestehen aus Schleifen von Kupferblech, wobei die Schleifenachse tangential zur Oberfläche des Kühlwasserrings liegt. Zur Unterstützung dieser Entwicklungsarbeiten wurden am Konrad-Zuse-Zentrum solche Antennen mittels umfangreicher Finite-Elemente-Simulationen an Phantomen und Patientenmodellen untersucht (siehe Abbildung 2.14). Zum Vergleich wurde auch der *Sigma-Eye*-Applikator der Firma BSD herangezogen.

Wesentliche Ergebnisse der Simulationsrechnungen waren:

- Einzelne magnetische Dipole erzeugen, wie erhofft, im Bereich der Körperoberfläche stärker tangential ausgerichtete und damit „glattere“ elektrische Felder.
- Bei Aggregaten mit 24 Antennen erzielen magnetische Dipolstrahler jedoch keine signifikant bessere Tumor-Erwärmung als elektrische Dipolstrahler.
- Es werden sehr große Ströme zum Betrieb der magnetischen Antennen benötigt, so daß mit hohen Verlusten zu rechnen ist.
- Der größte Anteil der Strahlung wird in die Umgebung emittiert (typischerweise über 70 % im Gegensatz zu weniger als 20 % beim Sigma-Eye-Applikator).

Für den praktischen Einsatz in einem Hyperthermie-Applikator sind offensichtlich noch entscheidende Verbesserungen vonnöten.

ENTWURF ELEKTRISCHER ANTENNEN MIT VERBESSERTER IMPEDANZ-ANPASSUNG. Ein weiterer Entwurf richtete sich auf elektrische Antennen mit opti-

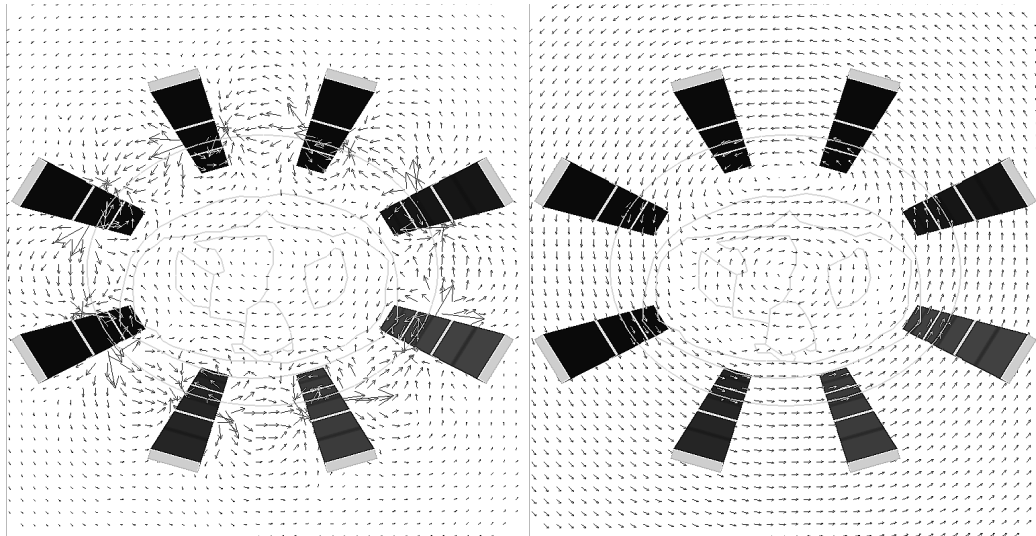


ABBILDUNG 2.14: Oben: Magnetfeld eines synchron angesteuerten Aggregats von 24 magnetischen Dipolstrahlern (oben links: Phase 0 Grad, oben rechts: 90 Grad). Die Felder sind auf einem horizontalen Schnitt durch ein Patientenmodell dargestellt; die gepunkteten Konturlinien bezeichnen Gewebegrenzen und den Rand des Kühlwasserringes. Zur besseren Darstellung entspricht die Länge der Vektorpfeile dem Logarithmus der Feldstärke. Das Feld für 0 Grad entspricht dem statischen, nicht ausbreitungsfähigen Feldanteil eines magnetischen Dipols. Links: Skizze einer magnetischen Dipolantenne; die Pfeile bezeichnen die Richtung des Stromflusses.

mierter Impedanz-Anpassung, welche beim *Sigma-Eye*-Applikator kritisch ist. Bei schlechter Impedanz-Anpassung ist die tatsächlich von den Antennen abgestrahlte Leistung schwer kontrollierbar.

Im Berichtszeitraum wurde basierend auf Simulationsrechnungen ein Prototyp einer solchen Antenne entwickelt. Es handelt sich um eine kurze Antenne in zylindrischer Ausführung [8], welche in speziell geformten, wassergefüllten Kassetten aus Plexiglas platziert wird (s. Abbildung 2.15). Die elektrischen Spiegelbilder der Antenne an den Grenzflächen zwischen Wasser und Kassettenwänden bzw. Luft wirken auf die Antennen symmetrierend und vermindern die Abhängigkeit ihrer Eingangsimpedanz von der elektrischen Beladung. Die Antenne besteht aus einem zentralen Fußpunkt-Stab, der an das koaxiale Speisekabel angeschlossen ist, und aus symmetrisch ausgeführten Querstäben. Die Querstäbe bilden eine Dachkapazität und verlängern elektrisch die Antenne. Dies erleichtert die Anpassung an den Generator. Durch Einsatz von Metallringen, die entlang des Fußpunktstabes

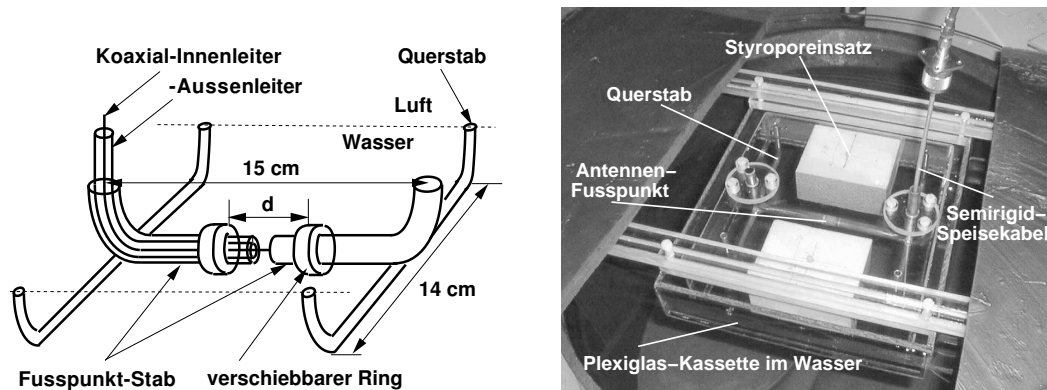


ABBILDUNG 2.15: Skizze einer Einzelantenne (links) und Anordnung zur meßtechnischen Verifikation der Einzelantenne eines Hyperthermie-Testapplikators (rechts).

geschoben werden können, kann der Wert der Eingangsimpedanz der Antenne abgestimmt werden.

Der Entwurf der Antennen wurde auf systematische Weise mit der „finite difference time domain“-Methode (FDTD) durchgeführt [4]. Die numerischen Ergebnisse wurden verifiziert durch Vergleiche mit der „volume surface integral equation“-Methode (VSIE) sowie mit Messungen in einer reflexionsarmen wassergefüllten Kammer.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Nichtlineares Modell für den Wärmetransport

Bearbeitet von: Martin Weiser, Martin Seebaß, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Peter Wust, Johanna Gellerman (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin)

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

Für die Simulation der Wärmeverteilung im Körper wird meist die „bio heat equation“ verwendet, wobei jedem Gewebetyp ein konstanter Perfusionswert zugeordnet wird. Eine realistischere Modellierung berücksichtigt die Temperaturabhängigkeit der Perfusion. Dadurch wird die „bio heat equation“ zu einer nichtlinearen Gleichung.

Im Berichtszeitraum wurde das 1996/97 zunächst für 2D entwickelte Programmpaket NEWTON-KASKADE zur Lösung nichtlinearer elliptischer Randwertaufgaben für dreidimensionale Probleme erweitert und auf die „bio heat equation“ angewendet [2]. Das Lösen der stationären Gleichung, ein wesentlicher Baustein für die Optimierung der Therapieparameter, gelingt damit deutlich schneller als

mit dem bis dahin für diesen Problemtyp benutzten Programmpaket KARDOS (bei Zeiteinbettung).

Optimale Positionierung von Thermoseeds

Bearbeitet von: Christian Alscher, Peter Deuffhard, Martin Seebaß

Kooperationspartner: Peter Wust (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin), Stefan A. Loening (Universitätsklinikum Charité der HU Berlin)

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

Eine Möglichkeit zur fokussierten Erwärmung des Tumorgewebes besteht in der Implantation sogenannter Thermoseeds, d.h. dünner Metallstifte aus einem ferromagnetischen Material. Diese können aus einem äußeren niederfrequenten magnetischen Feld Leistung absorbieren und dadurch das umliegende Gewebe erwärmen. Über den Curiepunkt des Materials tritt eine Selbstregulierung der Wärmeabgabe ein, die eine Überhitzung des Gewebes verhindert.

Ein maximaler Behandlungserfolg soll durch eine optimale Positionierung der Thermoseeds im Tumor erzielt werden. Als Optimierungsfunktional dient der mittlere quadratische Abstand der Temperaturverteilung von einer angestrebten therapeutischen Verteilung. Die Temperaturverteilung wird durch die Bio-Heat-Transfer-Equation beschrieben; im stationären Zustand wird auf der Seed-Oberfläche der Curiepunkt als erreicht angenommen.

Zur Lösung der semi-infiniten Optimierungsaufgabe soll ein Gauß-Newton-ähnliches Verfahren verwendet werden. Einer großen Anzahl von Zustandsvariablen, herrührend aus der Diskretisierung der Bio-Heat-Equation, steht eine moderate Anzahl von Steuervariablen zur Positionierung der Thermoseeds gegenüber. Daher sind effiziente Methoden zur Berechnung des Gradienten des Optimierungsfunktionals und einer lokalen Metrik erforderlich. Als wesentlicher Schritt zur Berechnung dieser lokalen Metrik wurden Methoden erarbeitet, die eine Approximation der Änderung der Temperaturverteilung bzgl. der Positionierungsparameter durch lokale und globale Moden verwenden.

Numerische Simulation von Photonen-Streuung in dissipativen Medien mittels Randelemente-Methoden

Bearbeitet von: Rudolf Beck

Kooperationspartner: D. Grosenick, H. Rinneberg und H. Wabnitz (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin)

Die heutige Standardmethode zum Erkennen von Brustkrebs ist die Mammographie mittels Röntgenstrahlen. Diese ist nicht sehr zuverlässig und belastet den Organismus.

Als Alternative wird an der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt in Berlin ein Diagnoseverfahren entwickelt, das auf der Streuung von Infrarot-Laserstrahlen beruht. Mit einer synchronen Bewegung von Quellen- und Detektorfaser wird hier die Brust in einem Raster-Verfahren durchleuchtet; Tumorgewebe soll durch sein abweichendes Streuverhalten erkannt werden. Das Verfahren wird bereits in der Klinik getestet.

Die Photonenausbreitung in Gewebe kann mit einer komplexen Diffusionsgleichung beschrieben werden; im Frequenzraum resultiert eine skalare Helmholtzgleichung mit stark dissipativem Anteil [3]. Wichtig ist eine zuverlässige Modellierung von Grenzschichten mittels spezieller Rand- und Übergangsbedingungen [HASKELL/SVAASAND/Tsay].

Simulationsrechnungen können hier zur Klärung wichtiger Fragestellungen beitragen. Da es sich bei dem Laser um eine Punktquelle handelt und die Modelle typischerweise aus wenigen homogenen Regionen bestehen, empfahl sich bei der Wahl des Verfahrens eine Randelemente-Methode. Ein entsprechender Code mit folgenden charakteristischen Eigenschaften wurde am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelt:

- parametrisierte Erzeugung von Simulationsmodellen,
- Implementierung spezieller Randbedingungen an Grenzschichten,
- Dreieckselemente mit konstanten, linearen und quadratischen Formfunktionen sowie mit Geometrie-Approximation in erster oder zweiter Polynomordnung,
- adaptive Verfeinerung der Gitter.

Bisherige Simulationsergebnisse für verschiedene Streuobjekte stimmen sehr gut mit den experimentellen Daten einer Diplomarbeit [3] überein. Abbildung 2.16 zeigt als Beispiel die Streuung an zwei Kugeln.

Epithesen-Planung

Bearbeitet von: Stefan Zachow (externer Diplomand), Detlev Stalling, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Tim Lüth (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin)

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden Werkzeuge zur Planung der roboterassistierten Implantation von Ohr-Epithesen entwickelt. Ziel ist es, mit Hilfe eines Operationsroboters einen Metallsteg am Schädelknochen eines Patienten zu befestigen, auf den dann später ein künstliches Ohr aufgesteckt werden kann. Als Planungsgrundlage dient ein hochaufgelöster CT-Scan des Patienten. In den Bilddaten müssen zunächst Marker lokalisiert werden, um die räumliche Registrierung des Datensatzes zu gewährleisten. Anschließend kann interaktiv festgelegt werden, wo am Schädel Bohrungen vorzunehmen sind. Dabei müssen gewisse

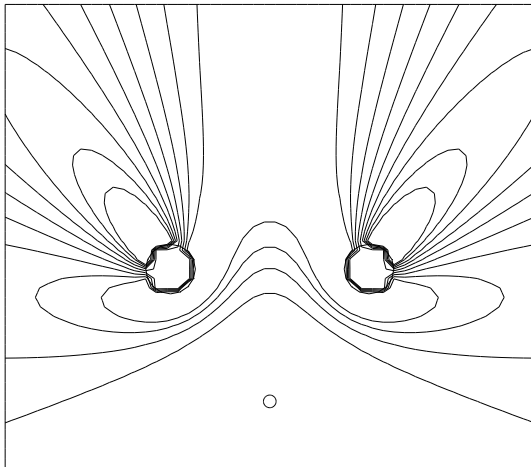


ABBILDUNG 2.16: Streuung von monochromatischer Laserstrahlung an zwei Kugeln (Mitte links und rechts). Gezeichnet ist ein Schnitt durch eine 3D-Anordnung; die Kugeln sind durch jeweils 32 isoparametrische Dreiecke zweiter Ordnung modelliert. Die Konturlinien kennzeichnen die Orte fester Phasenverschiebung zwischen gestreuter und einfallender Welle; die punktförmige Laserquelle befindet sich unten in der Mitte (kleiner Kreis).

Abstandsregeln eingehalten werden. Außerdem muß gewährleistet sein, daß eine ausreichende Knochendicke vorhanden ist. Entsprechende Planungsalgorithmen wurden in das am ZIB entwickelte Programmsystem HyperPlan integriert und werden zur Zeit am Virchow-Klinikum Berlin in der Arbeitsgruppe von T. Lüth evaluiert. Die automatische Erzeugung der für die Planung benötigten Polygonmodelle (siehe Abbildung 2.17) wurde in [6] untersucht.

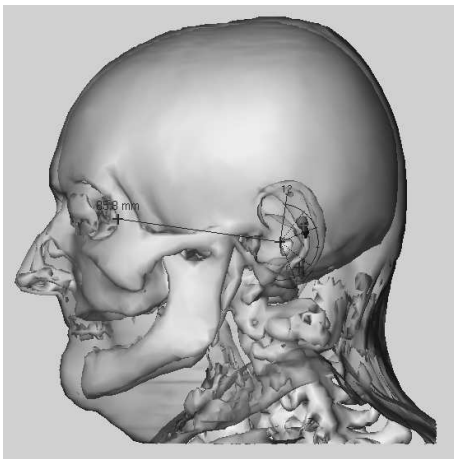


ABBILDUNG 2.17: 3D-Schädelmodell mit semi-transparenter Darstellung der Hautoberfläche, wie es bei der Planung der robotergestützten Implantation von Ohr-Epithesen verwendet wird.

Weiterentwicklung von HyperPlan zu einem kommerziellen Produkt

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

Kooperationspartner: Peter Wust (Virchow-Klinikum, Medizinische Fakultät Charité der HU Berlin), Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH (München), BSD Medical Corporation, Salt Lake City, USA

Das Software-System HyperPlan stellt die am ZIB in den vergangenen Jahren im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 273 „Hyperthermie: Methodik und Klinik“ entwickelten Algorithmen zur Hyperthermie-Planung in benutzerfreundlicher Weise zur Verfügung. Bereits 1996 wurde mit der Firma Dr. Sennewald Medizin-Technik GmbH in München eine Vereinbarung über den kommerziellen Vertrieb dieser Software getroffen. 1998 wurde nun eine überarbeitete Version von HyperPlan ausgeliefert, mit der erstmals alle Planungsschritte vollständig bearbeitet werden können. Im Laufe des Jahres wurden weitere Verbesserungen an der Bedienbarkeit, am Funktionsumfang sowie an der Dokumentation vorgenommen. Das Programm wird außerhalb Berlins zur Zeit an zwei Münchener Zentren sowie am Universitätsklinikum Rotterdam eingesetzt.

Publikationen

- [1] Peter Deuffhard and Martin Seebass, *Adaptive Multilevel FEM as Decisive Tools in the Clinical Cancer Therapy Hyperthermia*, Preprint SC 98-30, ZIB, 1998, to appear in Proc. Domain Decomposition 11, Greenwich, 1998.
- [2] Peter Deuffhard, Martin Weiser, and Martin Seebass, *A New Nonlinear Elliptic Multilevel FEM Applied to Regional Hyperthermia*, Preprint SC 98-35, ZIB, 1998.
- [3] V. Kirchner, *Beugung von Photonendichtewellen an sphärischen und zylindrischen Inhomogenitäten*, Master's thesis, Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin, 1996, Diplomarbeit am Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin.
- [4] Jacek Nadobny, Dennis Sullivan, Peter Wust, Martin Seebass, Peter Deuffhard, and Roland Felix, *A high-resolution interpolation at arbitrary interfaces for the FDTD method*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **46** (1998), no. 11, 1759–1766.
- [5] Martin Seebass, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege, Peter Wust, Roland Felix, and Peter Deuffhard, *New features of hyperplan, a hyperthermia planning system*, Proc. Hyperthermia in Clinical Oncology, Venice, 1998, p. 16.

- [6] Detlev Stalling, Martin Seebass, and Stefan Zachow, *Mehrschichtige Oberflächenmodelle zur computergestützten Planung in der Chirurgie*, Technical Report TR 98-05, ZIB, 1998.
- [7] Detlev Stalling, Malte Zöckler, Oliver Sander, and Hans-Christian Hege, *Weighted labels for 3D image segmentation*, Preprint SC 98-39, ZIB, 1998.
- [8] Waldemar Wlodarczyk, Jacek Nadobny, Peter Wust, Horst Fähling, and Gerhard Mönich, *Antennenkonzepte und Realisierungsbeispiele für die HF-Hyperthermie*, ITG-Fachbericht 149 Antennen, VDE-Verlag, 1998, München, pp. 335–338.

2.2.7 Virtuelle Labors

Theorie und Experiment werden heute ergänzt durch Simulation und Visualisierung. Zur Kombination der unterschiedlichen Forschungsweisen bedarf es integrierter Arbeitsumgebungen, sogenannter „Virtueller Labors“.

Übergreifendes Ziel der nachfolgenden Projekte ist die Entwicklung solcher rechnergestützter Arbeitsumgebungen. Sie bieten sowohl allgemeine Methoden zur Bildverarbeitung, geometrischen Modellbildung, numerischen Simulation und Visualisierung, als auch anwendungsspezifische Funktionen.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Malte Zöckler, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Klaus Obermayer und Michael Scholz (Fachgebiet Neuronale Informationsverarbeitung, Institut für Kommunikations- und Softwaretechnik, TU Berlin) Randolph Menzel und Robert Brandt (AG Neurobiologie, Institut für Tierphysiologie, FU Berlin), Martin Heisenberg und Karlheinz Rein (AG Genetik, Biozentrum, Universität Würzburg), Eckart Gundelfinger und Rainer Pilot (Abt. Neurochemie und Molekulare Biologie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg), Werner Zuschratter (Speziallabor Elektronen- und Konfokalmikroskopie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg) Karl-Friedrich Fischbach und Robin Hiesinger (Institut für Biologie III, Universität Freiburg/Br.)

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

Ziel dieses bundesweiten 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.

Voraussetzung dafür ist die Integration aller Einzelkomponenten zur Datenverarbeitung, Visualisierung und Datenanalyse in ein einheitliches Gesamtsystem - ein virtuelles dreidimensionales Neuroanatomielabor. Als Software-Plattform wird dafür das am ZIB entwickelte objektorientierte Visualisierungssystem „Amira“ verwendet, das bereits viele Standardwerkzeuge enthält und leicht um neue Methoden erweitert werden kann.

In Zusammenarbeit mit der AG Heisenberg wurden die Methoden zur automatischen Registrierung von anatomischen Objekten weiterentwickelt und auf eine große Anzahl von Individuen angewendet. Es wurden Werkzeuge entwickelt, um die so in ein gemeinsames Koordinatensystem gebrachten Strukturen miteinander zu verrechnen und zu vergleichen. Diese Verfahren wurden eingesetzt, um die anatomische Variabilität der optischen Loben von Fruchtfliegen zu untersuchen [6].

In Kooperation mit der AG Gundelfinger (IFN Magdeburg) wurden Methoden zum Referenzpunkt-basierten Warming integriert. Diese dienen dazu, nicht-affine Transformationen auf Bild- und Oberflächendaten anzuwenden. Damit können Daten, die z.B. durch mechanische Einwirkung deformiert sind, vergleichbar gemacht werden.

Neben vielen weiteren Neuentwicklungen und Verbesserungen in den Bereichen Visualisierung und Segmentierung [9] wurde das virtuelle Labor um ein Werkzeug erweitert, das es erlaubt, dreidimensionale Objekte im VRML-Format zu exportieren. Damit können Wissenschaftler auf Knopfdruck die von ihnen erstellten Modelle im Internet publizieren und miteinander austauschen.

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden neue Ansätze zur Erzeugung von Graphen aus Bilddaten von Neuronen entwickelt [7, 8].

Visualisierungsverfahren zur Allgemeinen Relativitätstheorie

Bearbeitet von: Werner Benger, Georg Ritter (Praktikant), Hans-Christian Hege

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

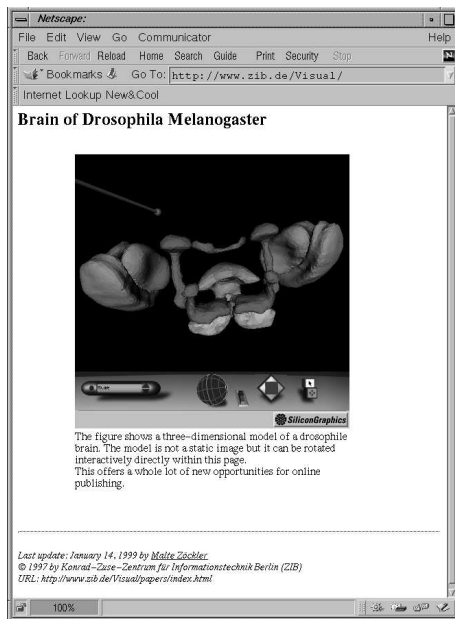


ABBILDUNG 2.18: Dreidimensionales Modell des Gehirns einer Fruchtfliege *Drosophila Melanogaster*, erzeugt durch Segmentierung eines konfokalen Mikroskopdatensatzes. Das resultierende Oberflächenmodell kann zur Publikation im Internet direkt als VRML exportiert werden.

Gesellschaft

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Zielsetzung des Kooperationsprojektes mit dem Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (auch Albert-Einstein-Institut) in Potsdam ist die Entwicklung

- von Werkzeugen zur interaktiven Visualisierung der immensen Datenmengen (bis zu mehreren 100 GB), die bei den numerischen Berechnungen zur Allgemeinen Relativitätstheorie anfallen und
- von neuen Darstellungsmethoden für dieses Gebiet, z.B. Verfahren zur Visualisierung vierdimensionaler Tensorfelder.

Das Programmpaket Amira wurde um ein Daten-Interface zum numerischen Simulationsprogramm Cactus erweitert. Das Interface muß mit den großen, zeitabhängigen Datenmengen umgehen und den vorhandenen Visualisierungsmodulen die Daten in kompatibler Weise zur Verfügung stellen. Mit Schnittflächen-, Isoflächen- Höhenfeld- und Gradientendarstellungen, sowie Vektorfeld- und Volumenvisualisierungen stehen nun variantenreiche und leicht bedienbare Darstellungsverfahren zur Verfügung (vgl. Abbildung 2.19). Aus Cactus-Datensätzen können damit ansprechende Animationen und Videos erzeugt werden.

Das hauseigene Visualisierungssystem Amira wurde um ein Echtzeit-Visualisierungsmodul für Cactus-Simulationsläufe erweitert (vgl. Abbildung 2.20), basierend auf dem von RZG und NCSA für die Supercomputing '97 entwickelten parallelen Isosurfacers. Des weiteren wurde Amira um ein experimentelles Raytracing-Interface ergänzt.

Gemeinsam mit AEI und NCSA wurde im April 1998 auf der Alliance'98 Conference die Demonstration „Transatlantic Interactive Visualization of Black Ho-

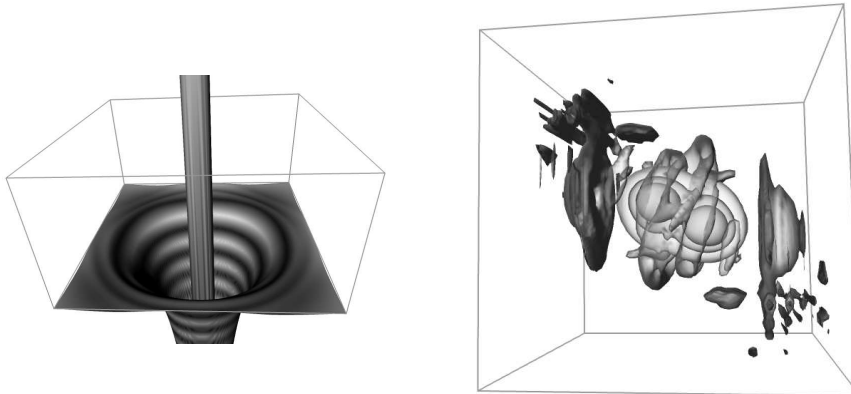


ABBILDUNG 2.19: Links: Höhenfelddarstellung der Radialkomponente der Metrik eines Schwarzen Loches; simuliert wurde eine „Brillwelle“ (spezieller Typ von Gravitationswellen) in der Umgebung eines Schwarzen Loches. Rechts: Darstellung von drei Isoflächen unterschiedlicher Dichte einer Neutronensternkollision (konzentrische Flächen im Zentrum) sowie der numerischen Abweichung von der exakten Lösung im Simulationsvolumen (dunkle, unstrukturierte Isoflächen).

le Interaction and Gravitational Wave Supercomputing“ durchgeführt. An der CRAY T3E des ZIB wurde eine allgemein relativistische Berechnung von Gravitationswellen durchgeführt, deren Resultate über eine exklusiv zur Verfügung gestellte Transatlantikverbindung¹ in Echtzeit in der Assembly Hall in Urbana/Champaign visualisiert wurden.

Eine weitere Demonstration fand auf der Supercomputing '98 in Orlando (USA) statt, unter Beteiligung der Argonne National Laboratories (ANL) und des San Diego Supercomputing Centers (SDSC). Die drei CRAY-T3E-Rechner an ZIB, RZG und SDSC wurden unter Verwendung des am ANL entwickelten Globus-Codes gekoppelt, um mit Cactus eine verteilte Simulation der Kollision von Neutronensternen durchzuführen und am Konferenzort on-line zu visualisieren [1]. Diese Demonstration wurde auf der Konferenz in Orlando mit dem „Most Stellar Award“ ausgezeichnet.

Künftig werden die Aufgabenbereiche „Entwicklung von Visualisierungsmethoden für die ART“ und „Verteilung von Simulation und Visualisierung“ personell aufgeteilt: Ab Jahresbeginn 1999 beschäftigt sich ein Mitarbeiter, im Rahmen des BMBF/DFN-geförderten Drittmittelprojektes „Tele-Immersion: Kollision Schwarzer Löcher“ ausschließlich mit der Netzverteilung (im Gigabit-Testbed Süd/Berlin).

¹An der Bereitstellung der Netzverbindung waren die Deutsche Telekom Berkom GmbH, sowie Teleglobe Canada Inc. maßgeblich beteiligt.

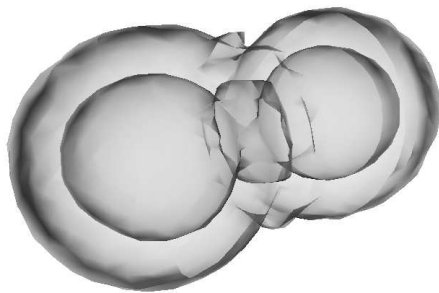


ABBILDUNG 2.20: Kollision zweier Neutronensterne im Moment des Auftretens einer Schockfront (berechnet mit Cactus). Der Simulationsablauf auf einer Cray T3E kann mit Amira in Echtzeit auf einer Grafikworkstation verfolgt werden.

Virtuelles RNA-Labor

Bearbeitet von: Christoph Best, Daniel Runge, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Hans-Christian Hege, Thomas Steinke

Kooperationspartner: Forschungsverbund RiNA GmbH, Arbeitsgruppe Jörn Manz (FU Berlin, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie)

Die Untersuchung biochemischer Makromoleküle ist ein Wechselspiel von Experiment und Simulation, in dem von der atomaren Zusammensetzung über die geometrische Struktur bis zu den Wirkungsmechanismen ein breites Spektrum von Fragestellungen bearbeitet wird. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung und Bereitstellung von Visualisierungstechniken, die die Erforschung von Biomolekülen unterstützen.

Den integrierenden Rahmen bildet das Softwaresystem Amira, für das neue Module entwickelt werden. Ausgehend von einem flexiblen Molekülformat wurden verschiedene Methoden zur Darstellung von Molekülen und Moleküleigenschaften implementiert. Weiterhin wurden Techniken zur Untersuchung der verschiedenen Konformationen in denen das Molekül vorliegt sowie zur Darstellung quantenmechanischer Prozesse entwickelt.

DATENHALTUNG. Um den Austausch von Daten zwischen Simulationsprogrammen und Visualisierungsanwendungen zu erleichtern, wurde eine C++-Bibliothek zur Speicherung strukturierter Daten, wie sie besonders in Molekulardynamik-Simulationen auftreten, geschaffen. Eines des dazugehörigen Datenformate wurde so gewählt, dass es sehr leicht auch von Fortran-Programmen, wie sie bei Simulationsanwendungen üblich sind, geschrieben werden kann [2].

RNA-Moleküls. Durch einen

MOLEKÜLVISUALISIERUNG. Zur Visualisierung von Molekülen wurde ein Modul entwickelt, das Molekülkonfigurationen in Open-Inventor-Szenengraphen übersetzt. Dabei stehen nicht nur übliche Visualisierungsweisen wie Wireframe- und Point-and-Stick-Darstellungen zur Verfügung, sondern auch eine abstrakte

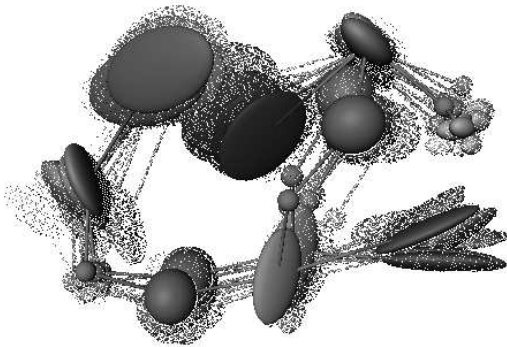


ABBILDUNG 2.21: Abstrakte Darstellung einer Konformation eines RNA-Moleküls. Durch einen OpenGL-Effekt kann die Veränderung der Konfiguration über mehrere Zeitschritte der Simulation als „Ausbleichen“ (*fading*) verfolgt werden.

Repräsentation, in der Atome des Moleküls zu Gruppen zusammengefaßt und durch ihre Trägheitsellipsoide dargestellt werden (Abbildung 2.21). Eine solche Darstellung erleichtert nach unseren Erfahrungen erheblich das visuelle Erfassen von Konformationsunterschieden.

Dieses Modul wurde zusammen mit dem Datenhaltungssystem in die Visualisierungssoftware Amira integriert.

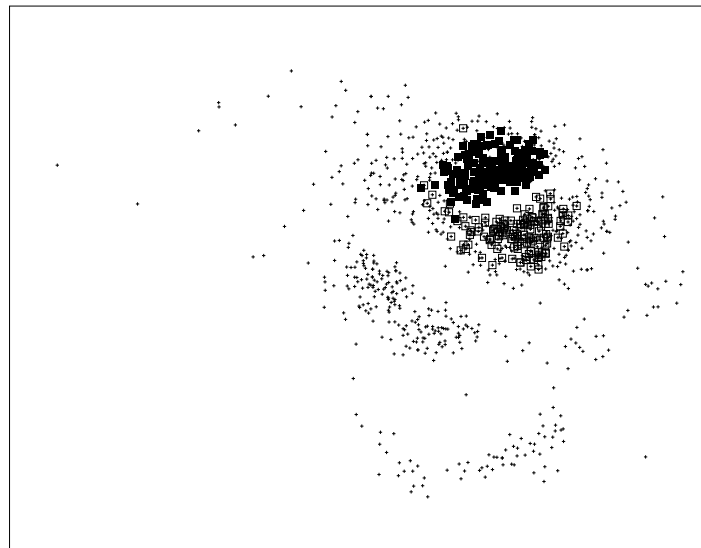


ABBILDUNG 2.22: Darstellung einer Molekulardynamik-Trajektorie als Punktmenge in der Ebene. Die offenen und gefüllten Quadrate zeigen zwei durch Cluster-Analyse erkannte Konformationen.

KONFORMATIONSDYNAMIK. Zur Untersuchung von Konformationen in Trajektorien aus Molekulardynamiksimulationen wurde ein Werkzeug entwickelt, das es erlaubt, die Konformationsdynamik einer solchen Trajektorie in einer Ebene

darzustellen (Abbildung 2.22). Punkte in der Ebene repräsentieren die einzelnen Konfigurationen der Trajektorie, wobei der Abstand zwischen den Punkten so gewählt ist, daß er der geometrischen Verschiedenheit der Konfigurationen entspricht. Konformationen erscheinen in einer solchen Darstellung deutlich als Punktgruppen [3].

Eine automatische Erkennung von Konformationen aufgrund ihrer geometrischen Ähnlichkeit ist mit Hilfe einer Cluster-Analyse möglich, in der die Menge der Konfigurationen aufgrund ihrer geometrischen Ähnlichkeit in disjunkte Untermengen zerlegt wird, deren Elemente jeweils einander ähnlicher sind als den Elementen anderer Untermenge. Dazu wurde ein Algorithmus entwickelt und implementiert. Ein Vergleich [4] dieses Verfahrens mit der dynamischen Konformationserkennung (s. Abschnitt 2.2.1) zeigt, daß beide Verfahren vergleichbare Ergebnisse liefern. Es erwies sich auch, dass die so identifizierten Cluster auch in der zweidimensionalen Darstellung Cluster bilden, diese einfache Darstellung also die wichtigen Freiheitsgrade der Konformationsdynamik erfaßt. Somit steht ein visuelles Hilfsmittel zur Identifikation von Konformationen in Molekulardynamiktrajektorien zur Verfügung. Eine Java-basiertes Benutzerinterface erlaubt die interaktive Analyse der Clusterzerlegung und die gleichzeitige Visualisierung der betreffenden Molekülkonfigurationen.

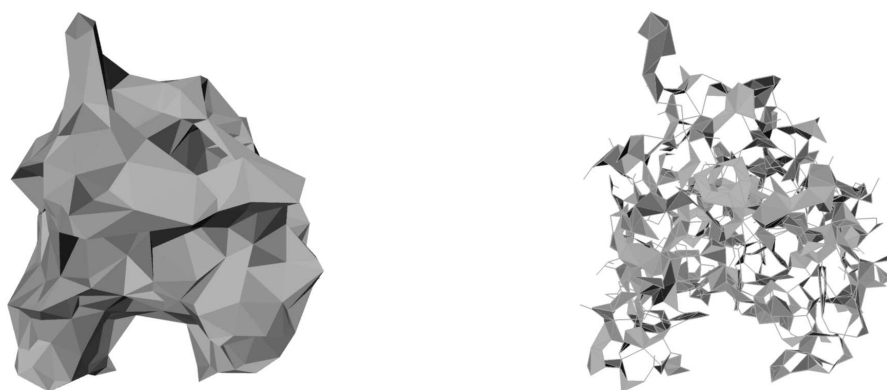


ABBILDUNG 2.23: Zwei Alpha Shapes der Ribonuklease T1. Dieses Enzym besteht aus 104 Aminosäure-Resten und spaltet einzelsträngige Ribonukleinsäure (RNA) mit hoher Spezifität für Guanin. Jeweils unten in der Mitte der Bilder sieht man ein aktives Zentrum des Moleküls.

ALPHA SHAPES. Manche Merkmale von Molekülen lassen sich durch sogenannte Alpha Shapes darstellen. Ein anschauliches Bild des Alpha Shapes einer gegebenen Punktmenge erhält man wie folgt: Man stelle sich eine Kugel mit Radius α vor, die in einem mit Material ausgefüllten Raum über die gegebene Punktmenge rollt. Die Kugel agiert wie ein Radiergummi, der in den erreichbaren Raumberei-

chen das Material wegnimmt, von den vorgegebenen Punkten jedoch am Vordringen in alle Raumbereiche gehindert wird. Die entstehende Oberfläche besteht aus dreiecksförmigen Kugelflächen, Kreissegmenten und einer Teilmenge der vorgegebenen Punktmenge. Der Alpha Shape ergibt sich nun, indem die Kugelflächen durch Dreiecke und die Kreissegmente durch gerade Kanten ersetzt werden. Ein Algorithmus von Mücke zur Konstruktion von Alpha Shapes für beliebige Punktmenge im Raum wurde als Modul in Amira implementiert.

Verwendet man die Atommittelpunkte eines Moleküls als Punktmenge, erhält man ein „Bild“ des Moleküls. Durch Variation des Parameters α kann man das Molekül auf verschiedenen Detail-Ebenen anschauen (vgl. Abbildung 2.23) und schnell einen Eindruck von der räumlichen Struktur des Moleküls gewinnen. Auf verschiedenen Detail-Ebenen treten unterschiedliche Strukturmerkmale zutage. Auch Hinweise auf mögliche aktive Zentren lassen sich gewinnen.

MOLEKÜLOBERFLÄCHEN UND -INTERFACES. Für die „Oberfläche“ eines Moleküls sind verschiedene Definitionen denkbar, je nach physikalischer Fragestellung. Für Biochemiker von besonderem Interesse sind folgende Moleküloberflächen:

- die Oberfläche der Van-der-Waals-Kugeln der Atome des Moleküls (*Van-der-Waals-Oberfläche*)
- die Vereinigung aller Trajektorien, die vom Mittelpunkt einer „Lösungsmittelkugel“ beim Rollen über Van-der-Waals-Kugeln beschrieben werden (*Solvent-Accessible-Surface*)
- das Komplement der Vereinigung aller Lösungsmittelkugeln, die kein Atom des Moleküls schneiden (*Solvent-Excluded-Surface*).

Von Interesse für den Biochemiker ist auch, wie Sekundärstrukturen eines Moleküls relativ zueinander gelagert sind. Die visuelle Erfassung solcher Beziehungen wird durch eine graphische Darstellung der Schnittflächen dieser Atomgruppen oft erleichtert.

Zur Konstruktion und graphischen Darstellung von Berührungs- und Schnittflächen zwischen einzelnen Atomen eines Moleküls, aber auch zwischen Atomgruppen oder ganzen Molekülen, wurde ein Modul in Amira entwickelt. Es erlaubt weiterhin, die Van-der-Waals-Oberfläche und Solvent-Accessible-Surface des Moleküls zu berechnen und darzustellen. Auf diesen Oberflächen können Eigenschaften des Moleküls (elektrostatisches Potential, Hydrophobizitätseigenschaften, etc.) farblich kodiert werden (Abbildung 2.24). Ein Algorithmus zur Berechnung der aus mehreren Gründen noch interessanteren Solvent-Excluded-Surfaces wird derzeit entwickelt.

QUANTENMECHANIK. Um quantenmechanische Wellenfunktionen zu visualisieren, wurde das Programmsystem Amira für die Behandlung komplexwertiger

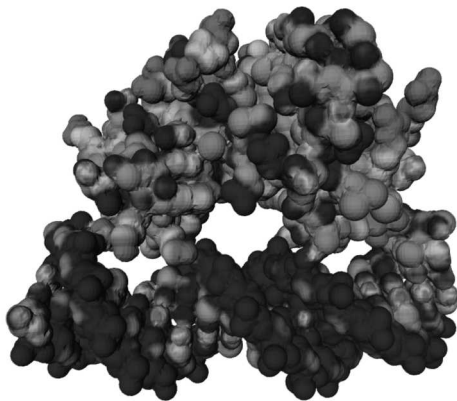


ABBILDUNG 2.24: Elektrostatisches Potential des Moleküls FIS (Factor for Inversion Simulation), dargestellt durch Graustufenkodierung auf der Van-der-Waals-Oberfläche. FIS bindet an eine Vielzahl von DNA-Sequenzen.

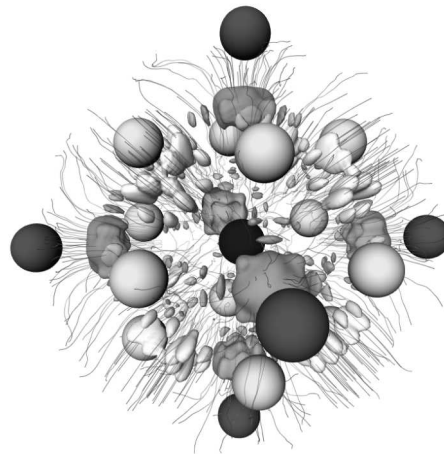


ABBILDUNG 2.25: Photodissoziation von HF in einem Argonkristall (Zeitschritt nach 5 fs). Isofläche der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte und Stromlinien der Wahrscheinlichkeitsstromdichte des Protons.

Skalarfelder erweitert. Es können jetzt verschiedene Darstellungstechniken für Skalarfelder, wie Schnitte, Isoflächen oder Volumerendering, angewendet werden. Für eine quantenmechanische Wellenfunktion kann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte berechnet werden, die mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eine Kontinuitätsgleichung erfüllt. Zu deren Darstellung stehen verschiedene Visualisierungstechniken für Vektorfelder zur Verfügung.

In Zusammenarbeit mit der Molekulardynamikgruppe der Abteilung Numerische Analysis und Modellierung wurde die quantenklassisch modellierte Photodissoziation von HF in einem Argonkristall visualisiert. Die Wellenfunktion des Protons wurde mit Hilfe von Isoflächen und Stromlinien dargestellt (Abbildungen 2.25 und 2.6).

Um die Struktur der dreidimensionalen Wahrscheinlichkeitsstromdichte besser erfassen zu können, wurde begonnen, Algorithmen zur Analyse und Darstellung der Topologie von Vektorfeldern zu implementieren.

Im Hinblick auf die Teilnahme an der Ausstellung “Sieben Hügel - Bilder und Zeichen des 21. Jahrhunderts” mit einem Exponat zur Quantenphysik wurden die Energieeigenfunktionen des Wasserstoffatoms sowie ein Gaussches Wellenpaket

im harmonischen Oszillatorpotential als Demonstrationsbeispiele implementiert.

Schnelle Datenassimilation in Brandversuchen

Bearbeitet von: Wolfgang Kühn, Olaf Paetsch

Kooperationspartner: Manfred Korzeń, BAM, Berlin

Das Laboratorium Brandingenieurwesen der BAM bewertet das brandschutztechnische Verhalten von Bauteilkonstruktionen. Im Rahmen der Qualitätssicherung bei Prüfung und Zertifizierung sollen Modellbildung und numerische Simulation die Güte der Prüfungsergebnisse verifizieren beziehungsweise erhöhen.

Zur Ermittlung der Feuerwiderstandsdauer von bekleideten Trägern und Stützen wird die Temperatur auf der Bauteiloberfläche während eines Brandversuches mithilfe von Thermoelementen erfaßt. Es wurde eine Methode entwickelt, diese an diskreten Punkten gemessene Temperaturen über der Zeit und der Bauteiloberfläche zu interpolieren.

Als physikalisches Modell wird eine nichtlineare, zeitabhängige Wärmeleitungsgleichung zugrunde gelegt, die eine Temperaturabhängigkeit der Materialparameter berücksichtigt. Zum Abgleich des Modells mit den Beobachtungen im Brandversuch werden die Sensordaten in einem dynamischen Prozess durch eine Rechnersimulation *assimiliert*.

Mit Hilfe einer räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der ein- oder zweidimensionalen Wärmeleitungsgleichung ist das Assimilationsproblem sehr schnell und effizient zu lösen [5]. Die entsprechenden Algorithmen sind in *Java* implementiert und über das Internet ausführbar.

Publikationen

- [1] Werner Benger, Ian Foster, Jason Novotny, Edward Seidel, John Shalf, Warren Smith, and Paul Walker, *Numerical relativity in a distributed environment*, accepted for: Ninth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing '99 (1998).
- [2] Christoph Best, *A simple C++ library for manipulating scientific data sets as structured data*, TR 98-06, ZIB, 1998.
- [3] Christoph Best and Hans-Christian Hege, *Visualizing conformations in molecular dynamics*, SC 98-42, ZIB, 1998.
- [4] Wilhelm Huisinga, Christoph Best, Frank Cordes, Rainer Roitzsch, and Christoph Schütte, *From simulation data to essential conformations: A comparison of methods*, SC 98-36, ZIB, 1998.
- [5] Wolfgang Kühn, Manfred Korzeń, and Olaf Paetsch, *Fast data assimilation in fire tests of steel members*, SC 98-33, ZIB, 1998.

- [6] Karlheinz Rein, Malte Zöckler, and Martin Heisenberg, *A quantitative three-dimensional model of the drosophila optic lobes*, in press: Current Biology, Vol. 9 No. 2 (1999), 93–96.
- [7] Hartmut Schirmacher, *Extracting graphs from three dimensional neuron data sets*, Master's thesis, Diplomarbeit 1998, <http://www.zib.de/Visual/papers/dipl.html>.
- [8] Hartmut Schirmacher, Malte Zöckler, Detlev Stalling, and Hans-Christian Hege, *Boundary surface shrinking - a continuous approach to 3D center line extraction*, Proc. Image and Multidimensional Signal Processing – IMDSP'98 (B. Girod, H. Niemann, and H.-P. Seidel, eds.), IEEE Signal Processing Society, 1998, pp. 25–28.
- [9] Detlev Stalling, Malte Zöckler, and Hans-Christian Hege, *Segmentation of 3D medical images with subvoxel accuracy*, Proceedings Computer Assisted Radiology and Surgery '98 (CAR'98) (H. U. Lemke, K. Inamura, M. W. Vannier, and A. G. Farman, eds.), 1998, pp. 137–142.
- [10] Detlev Stalling, Malte Zöckler, Oliver Sander, and Hans-Christian Hege, *Weighted labels for 3D image segmentation*, Preprint SC 98-35, ZIB, 1998.

2.2.8 Computeralgebra und Dynamik

In diesem Projekt untersuchen wir Methoden der Computeralgebra und wenden sie auf Fragestellungen der Dynamik an. Die Spannbreite reicht dabei von der Lösung von Gleichungssystemen wie sie in den Anwendungen wie Robotik, Chemie und Dynamik auftreten bis zu den strukturellen Untersuchungen von partiellen Differentialgleichungen.

Symmetrienausnutzung mittels Invariantentheorie

Bearbeitet von: Karin Gatermann

Kooperationspartner: Reiner Lauterbach (Universität Hamburg), Peter Kovacs (Technische Universität Berlin)

Eine Methode im Gebiet der äquivarianten dynamischen Systeme besteht darin, die Gruppe mittels eines Tricks zu eliminieren. Dazu wird eine Hilbert Basis des Invariantenringes benutzt, so daß ein anderes Differentialgleichungssystem entsteht, das die Dynamik modulo der Symmetrioperationen beschreibt.

Dabei beeinflußt die Wahl der Basis des Invariantenringes die Struktur des neuen Differentialgleichungssystems. Durch Ausnutzung der Cohen-Macaulay Eigenschaft des Invariantenringes können Koordinaten so geschickt gewählt werden, daß wesentliche Strukturen des äquivarianten dynamischen Systems wiedergefunden werden. Diese Wahl der Koordinaten ermöglicht insbesondere eine ein-

fachere Untersuchung der Stabilität und damit von Verzweigungsphänomenen. Diese deutliche Vereinfachung wird in [1] am Beispiel einer Moden Interaktion im Taylor-Couette Problem illustriert.

Sind polynomielle Gleichungssysteme symmetrisch, so kann man bei ihrer Lösung diese zusätzliche Struktur auf verschiedene Weisen ausnutzen. Allein die Verwendung von Invariantentheorie führt auf drei verschiedene Methoden.

Die neueste ergibt sich aus neuen Ergebnissen von H. Derksen für die Invariantentheorie von algebraischen Gruppen. Die Vergleichsrechnung in Tabelle 2.2 zeigt eine Überlegenheit der Methode, die Äquivariante benutzt. Zur Berechnung von Invarianten und Äquivarianten siehe [1], [3], [4].

Die symmetrischen Gleichungssysteme, die in der Robotik und Chemie auftreten, haben eine größere Komplexität, so daß neben weiteren Eliminationstechniken wie Dixon-Resultante auch heuristische Methoden benutzt werden.

Problem	Gruppe	n	Alg. mit Invarianten	Alg. mit Äquivarianten	Alg. für alg. Gruppen
Hexan	D_3	3	85 s	7 s	12 s
Multi-Body Sys.	Z_2	6	> 2 Tage	45675 s	3 Tage
Lotka-Volterra	D_3	3	42 s	8 s	2505 s

Tabelle 2.2: Vergleich von verschiedenen Lösungsmethoden für Gleichungssysteme mit Symmetrie.

Dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie

Bearbeitet von: Karin Gatermann

Kooperationspartner: Markus Eiswirth (Fritz-Haber-Institut Berlin), Birkett Huber (MSRI Berkeley, USA)

Chemische Reaktionsprozesse werden mit Hilfe von Pfeilen beschrieben, die insgesamt einen gerichteten Graphen bilden (Bild 2.26). Daraus leitet man für die Konzentrationen von chemischen Substanzen ein System von Differentialgleichungen her. Das Modell der Massenerhaltung, das von Feinberg, Clarke und anderen untersucht wurde, führt dabei auf ein dünnbesetztes polynomielles System. Die chemischen Reaktionskonstanten sind dabei die Parameter dieses Systems. Die Struktur des Graphen dominiert die Struktur der Gleichungen. Als erstes stellt sich die Frage nach den positiven reellen Lösungen des algebraischen Gleichungssystems. Die Resultate von Feinberg für besonders einfach geartete Fälle (Deficiency-Zero-Theorem und Deficiency-One-Theorem) konnten mit alternativen Beweisen nachvollzogen und erweitert werden.

Für den allgemeinen Fall werden die Ergebnisse aus der reellen algebraischen Geometrie angewendet. Die Anzahl der positiven reellen Lösungen ist für gewisse Parametergebiete die Anzahl der alternierenden Zellen in der gemischten Unterteilung der Newton-Polytope. Die Ränder des Parametergebietes werden durch das Nullstellengebilde eines Polynoms in den Koeffizienten des Gleichungssystems beschrieben.

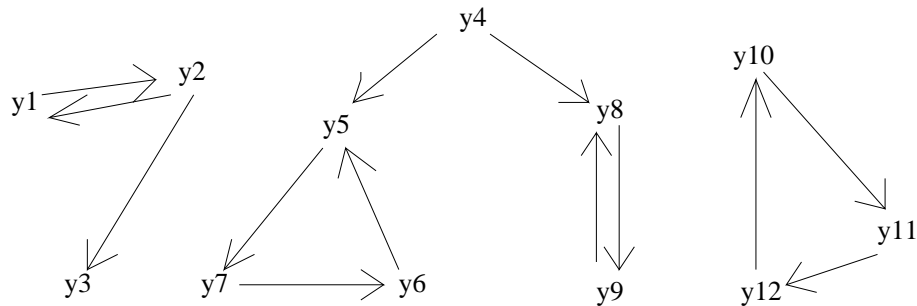


ABBILDUNG 2.26: Ein Reaktionsgraph mit 12 Komplexen $y_i \in \mathbf{N}^m$ aus chemischen Substanzen, drei Zusammenhangskomponenten und vier terminalen strengen Zusammenhangskomponenten. Die Struktur des Graphen bestimmt die Struktur des Gleichungssystems.

Untersuchung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen

Bearbeitet von: Thomas Wolf

Kooperationspartner: V. Sokolov (Moskau), George Bluman, Allan Wittkopf und Greg Reid (Vancouver, Kanada), Andreas Brand (Universität Jena)

Förderung: EPSRC Visiting Research Fellowship grant, London Mathematical Society grant, Symbolic Computation Group at Waterloo

Im Berichtszeitraum wurde das Programm CRACK zur Lösung überbestimmter Differentialgleichungssysteme weiterentwickelt. Dazu zählt die Entwicklung von Algorithmen und deren Implementation

- zur allgemeinen Lösung unterbestimmter linearer gewöhnlicher DGLn,
- zur systematischen Längenreduktion von Paaren von Gleichungen,
- zur Beseitigung von unwesentlichen freien Konstanten und Funktionen in allgemeinen Lösungen von Differentialgleichungen,
- zur effizienten Bestimmung von überbestimmten Untersystemen von Gleichungssystemen,
- zur Auswahl von Substitutionen in polynomialen algebraischen Gleichungssystemen mit minimalem Größenwachstum des Systems.

Auch wurde an der Übertragung der Implementation auf Maple gearbeitet. Im Bereich der Anwendung von CRACK wurden Fortschritte in der Berechnung von Erhaltungsgrößen (engl.: conservation laws) erzielt [6, 7], die zur Klassifizierung und Linearisierung von Evolutionsgleichungen benutzt wurden [8]. Diese Methoden sind sogar allgemein für die Linearisierung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen anwendbar.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Gröbner Basen (Karin Gatermann)

Die Arbeit aus dem Vorjahr bzgl. des Erkennens von Gröbner Basen wurde fortgesetzt. Dabei handelt es sich um die Frage, ob ein gegebenes System von Polynomen bereits eine Gröbner Basis bzgl. irgendeiner Termordnung ist. Das Auffinden dieser Ordnung (falls sie existiert) ist die Aufgabe des Algorithmus. Fortschritte wurden für dünnbesetzte Polynome erzielt, in dem die bekannten Methoden von Sturmfels und Wiegelmann angepasst wurden. Die Komplexität ist für dünnbesetzte Polynomsysteme deutlich niedriger als vorausgesagt [1].

Differentielle Gröbner Basen (Thomas Wolf)

Im Zusammenhang von Lie Symmetrie Untersuchungen von Differentialgleichungen ist die Umformung von Differentialgleichungen in eine geeignetere Form ein wichtiger Baustein. Die effiziente Berechnung von differentiellen Gröbner Basen des zugehörigen differentiellen Ideals ist deshalb eine wichtige Aufgabe. Die Arbeit [5] liefert dazu einen größeren Fortschritt.

Publikationen

- [1] K. Gatermann, *Computer Algebra methods for equivariant dynamical systems*, Habilitationsschrift (Freie Universität Berlin), eingereicht 1998.
- [2] K. Gatermann, B. Huber, *A family of sparse polynomial systems arising in chemical reaction systems*, In Vorbereitung, 1998.
- [3] K. Gatermann, *Semi-invariants, equivariants and algorithms*, *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing* 7, 105-124, 1996.
- [4] K. Gatermann, F. Guyard, *Gröbner bases, invariant theory and equivariant dynamics*, *J. Symbolic Computation* 27, 1–28, 1999.
- [5] T. Wolf, *Size reduction and partial decoupling of systems of equations*, eingereicht bei ISSAC 99, 1998.
- [6] T. Wolf, *A comparison of four approaches to the calculation of conservation laws*, Preprint SC 99–01, ZIB, 1998.
- [7] T. Wolf, A. Brand, M. Mohammadzadeh, *Computer algebra algorithms and routines for the computation of conservation laws and fixing of gauge in diffe-*

rential expressions, Preprint SC 98–05, ZIB, 1998, J. Symbolic Computation 27, 221–238, 1999.

- [8] V.V. Sokolov, T. Wolf, *A symmetry test for quasilinear coupled systems*, Preprint SC 99–02, ZIB, 1999, angenommen zur Veröffentlichung in ‘Inverse Problems’.

2.2.9 Diskrete Strukturen

Bei der mathematischen Untersuchung von Algorithmen erweist sich die Kenntnis möglichst vieler Eigenschaften der zugrundeliegenden diskreten Strukturen als nützlich. In der kombinatorischen Optimierung spielt die Graphen- und die Polyedertheorie eine besondere Rolle. Untersuchungen in diesen Gebieten haben – wegen der Universalität grundlagenorientierter Forschung – häufig auch Anwendungen in anderen Gebieten der Mathematik.

So sind *perfekte Graphen* in der kombinatorischen Optimierung von Bedeutung, u.a. da man eine vollständige Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops kennt. Die Untersuchung perfekter Graphen motiviert andererseits interessante grundlagentheoretische Fragestellungen und Konzepte in der Graphentheorie.

Polyedrische Unterteilungen – insbesondere *Triangulierungen* – sind ein wichtiges Hilfsmittel in der algorithmischen Geometrie. Bei der Erforschung ihrer Struktureigenschaften stoßen wir wiederum auf eine Fülle von Verbindungen zur Topologie, Algebra und Geometrie.

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

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: 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 ein kombinatorisches Optimierungsproblem an der Schnittstelle zwischen Graphentheorie, Ganzzahliger Optimierung und Komplexitätstheorie. Die Bestimmung der Stabilitätszahl eines Graphen findet häufig als Modell für ganzzahlige Optimierungsprobleme Anwendung (siehe auch das Projekt zur Frequenzzuweisung im Mobilfunk). Deshalb ist die Kenntnis von Graphenklassen von Bedeutung, für welche das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar ist.

Die Stabilitätszahl eines Graphen kann durch lineare Optimierung über seinem *Stabile-Mengen-Polytop*, der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren seiner stabilen

Mengen, berechnet werden. Ist die Menge der facettendefinierenden Ungleichungen dieses Polytops bekannt und können diese Ungleichungen polynomial separiert werden, ist das Stabile-Mengen-Problem für diesen Graphen in polynomialer Zeit lösbar.

Auf dieser Grundlage bewiesen Grötschel, Lovász und Schrijver 1981 die Existenz polynomialer Algorithmen zur Bestimmung der Stabilitätszahl für eine Reihe von Graphenklassen. Die größte und bedeutendste dieser Klassen ist die der perfekten Graphen. Das Stabile-Mengen-Problem ist auf perfekten Graphen äquivalent zum Cliques-Überdeckungs-, zum Cliques- und zum Färbungsproblem. Vielfältige ganzzahlige Optimierungsprobleme können als eines dieser Probleme modelliert werden. Weiter sind perfekte Graphen durch folgende polyedertheoretische Charakterisierung ausgezeichnet: die Nicht-Negativitäts- und Cliques-Ungleichungen liefern bereits eine vollständige Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops. Trotz dieser bedeutenden Eigenschaft ist die Klasse der 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, siehe [3]. Studium extremaler Graphen bzgl. verschiedener Klassen perfekter Graphen wie in [6].
- 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, siehe [7]. Neben dem Auftreten kritischer Kanten in verschiedenen Klassen perfekter Graphen interessiert uns die Charakterisierung sog. kritisch perfekter Graphen, die ausschließlich kritische Kanten besitzen (siehe Abbildung 2.27).
- Untersuchung des Stabile-Mengen-Polytops imperfekter Graphen, die aus perfekten Graphen durch Entfernen kritischer Kanten entstehen. Für verschiedene Graphen dieses Typs wurden bereits facettendefinierende Ungleichungen identifiziert, siehe [8]. Für eine dieser Graphenklassen konnte gezeigt werden, daß die gefundenen Ungleichungen das Stabile-Mengen-Polytop vollständig beschreiben.

Polyedrische Unterteilungen

Bearbeitet von: Jörg Rambau

Kooperationspartner: Paul Edelman, Victor Reiner (University of Minnesota, Minneapolis, USA); Francisco Santos (Universidad de Cantabria, Santander,

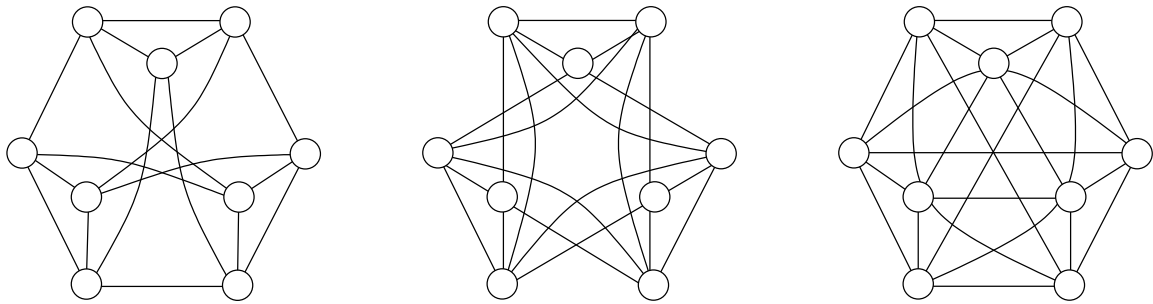


ABBILDUNG 2.27: Beispiele kritisch perfekter Graphen.

Spanien)

Polyedrische Unterteilungen von Punktkonfigurationen sind Zerlegungen der konvexen Hülle einer endlichen Punktmenge im euklidischen Raum in endlich viele Polytope, deren Ecken in der gegebenen Punktkonfiguration liegen. Sind alle Polytope Simplizes, so spricht man von Triangulierungen. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können (s. Abbildung 2.28(a)), erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [4]. 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 Punktkonfigurationsklassen betrachtet. Nachdem bereits in 1997 gezeigt werden konnte, daß für zyklische Polytope die Halbordnung aller polyedrischen Unterteilungen sphärisch ist [5], ist im vergangenen Jahr das bisher allgemeinste Resultat erzielt worden: Die Halbordnung aller durch Projektion zwischen zyklischen Polytopen induzierten polyedrischen Unterteilungen ist sphärisch [1]. Die zyklischen Polytope bilden damit die erste Polytopklasse ohne Beschränkung der Dimension, Kodimension oder Eckenzahl, für die diese Eigenschaften bewiesen werden konnten.

Durch eine Verallgemeinerung des sogenannten *Cayley-Tricks* aus der Diskriminantentheorie auf *induzierte* Unterteilungen konnte folgendes gezeigt werden: Sei $\mathcal{A} := \mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_k$ eine Familie von Punktkonfigurationen im euklidischen Raum \mathbb{R}^d . Die Halbordnung aller (induzierten) Unterteilungen der Cayley-Einbettung von \mathcal{A} ist isomorph zur Halbordnung aller (induzierten) Unterteilungen der (gewichteten) Minkowski-Summe von \mathcal{A} . Dies liefert zusammen mit einem früheren Resultat von Santos in [2] einen neuen, unabhängigen Beweis des berühmten Bohne-Dress-Theorems aus der Theorie der orientierten Matroide.

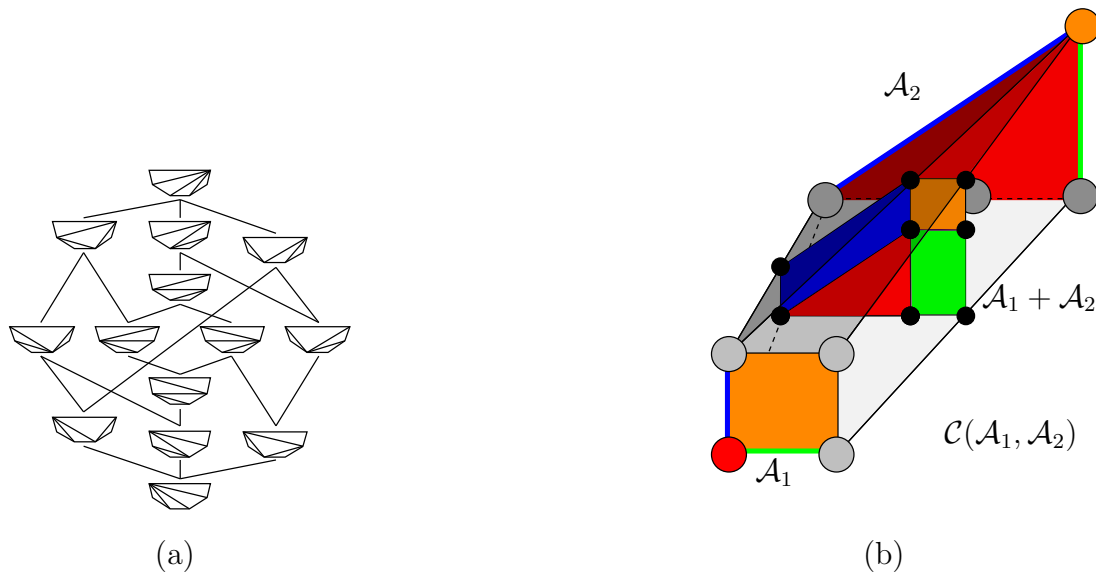


ABBILDUNG 2.28: Die (Tamari-)Halbordnung aller Triangulierungen eines Sechsecks (a); die Cayley-Trick-Korrespondenz (b).

Publikationen

- [1] C. Athanasiadis, J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes II*, Manuskript, 1998.
- [2] B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Manuskript, 1998.
- [3] S. Hougardy, V. Le und A. Wagler, *Wing-triangulated graphs are perfect*, Journal of Graph Theory 24, Nr. 1 (1997), 25–31.
- [4] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, Dissertation, TU Berlin. Erschienen in: Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996.
- [5] J. Rambau and F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes*, ZIB Preprint SC 98–14, ZIB, 1998, erscheint in: European Journal of Combinatorics.
- [6] Z. Tuza und A. Wagler, *Minimally non-preperfect graphs of small maximum degree*, Preprint SC 97–28, ZIB, 1997.
- [7] A. Wagler, *On critically perfect graphs*, Preprint SC 96–50, ZIB, 1997.
- [8] A. Wagler, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, Preprint SC 97–46, ZIB, 1997, erscheint in: Discrete Applied Mathematics.

2.2.10 Nichtlineare Optimierung

In diesem Arbeitsgebiet werden zwei Klassen hochdimensionaler nichtlinearer Optimierungsprobleme untersucht. Konkret sind dies konvexe Probleme aus der mehrstufigen stochastischen Optimierung sowie semidefinite Programme. Letztere betrachten wir insbesondere im Zusammenhang mit Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme. Zur Lösung kommen in beiden Fällen Innere-Punkt-Methoden zum Einsatz. Struktureigenschaften werden in den semidefiniten Programmen durch Spektrale Bündelverfahren, in der stochastischen Optimierung durch spezielle rekursive Algorithmen ausgenutzt.

Semidefinite Programmierung

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

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

Semidefinite Programme verallgemeinern lineare Programme, indem auch positiv semidefinite Matrixvariable zugelassen werden. Der Kegel der positiv semidefiniten Matrizen bietet Möglichkeiten zur Modellierung nichtlinearer Nebenbedingungen, die über den Bereich der konvexen quadratischen Programmierung hinausgehen. Anwendungen der Semidefiniten Programmierung finden sich in der Kontrolltheorie, der robusten Optimierung, der Materialoptimierung, im Entwurf von Schaltkreisen und nicht zuletzt in der kombinatorischen Optimierung.

Semidefinite Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme.

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, deren Verbesserung durch geeignete Schnittebenen und Methoden zur Fixierung von Variablen haben wir uns bereits in früheren Arbeiten befaßt und Erfahrung in der Implementierung gesammelt [1, 3, 5, 6].

Zur Zeit arbeiten wir an der Entwicklung eines Codes zur Lösung allgemeiner Semidefiniten Programme auf Basis Primal-Dualer Innere-Punkte-Verfahren, der umfangreiche Möglichkeiten zur Realisierung von Schnittebenenverfahren in der semidefiniten Optimierung bieten soll.

Spektrale Bündelverfahren. Primal-Duale Innere-Punkte-Verfahren erlauben zwar semidefinite Programme in “polynomialer Zeit” numerisch stabil zu lösen, sind aber bei der Berechnung großer Probleme zu langsam, da Struktureigenschaften von Kosten- und Nebenbedingungsmatrizen nur sehr eingeschränkt ausgenutzt werden können. Bessere Möglichkeiten eröffnet hier das von uns entwickelte Spektrale Bündelverfahren [4], das sich besonders zur schnellen Bestimmung guter Näherungslösungen von Eigenwertoptimierungsaufgaben — die meisten se-

midefiniten Relaxierungen kombinatorischer Probleme lassen eine derartige Formulierung zu — eignet.

Das Spektrale Bündelverfahren ist eine Spezialisierung der proximalen Bündelverfahren der nichtglatten konvexen Optimierung auf Eigenwertoptimierungsprobleme. Ähnlich dem traditionellen Bündelansatz erstellt 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 Funktionswert- und Subgradienten- sowie Modellberechnung balanciert werden kann.

Subgradienten bestimmen sich aus den Eigenvektoren zu den extremalen Eigenwerten. Die zur Berechnung der Eigenvektoren eingesetzten Lanczos-Algorithmen erlauben es, die Struktur des Problems auszunützen. Die Konvergenzgüte des Lanczos Verfahrens hängt davon ab, wie gut der maximale Eigenwert von den restlichen Eigenwerten getrennt ist. Da bei Minimierung des maximalen Eigenwerts generisch die nächsten Eigenwerte zum größten aufschließen, stellt die Implementierung des Lanczos Algorithmus als Unteroutine zum spektralen Bündelverfahren eine besondere Herausforderung dar. Hier konnten durch geeignete Kombination der Verfahren und durch die Verwendung polynomialer Spektraltransformationen wesentliche Verbesserungen erzielt werden.

Vorzeichenbedingungen im Spektralen Bündelverfahren. Das Verfahren in [4] geht ausschließlich von Gleichungsnebenbedingungen aus. Ungleichungen führen in der Formulierung als ein Eigenwertoptimierungsproblem zu Vorzeichenbedingungen an die Entscheidungsvariablen. Bei unüberlegter Einbindung dieser Vorzeichenbedingungen kommt es zu inakzeptablen Laufzeitsteigerungen. In [2] wurde eine Erweiterung vorgestellt, in der Ungleichungen ohne nennenswerte Laufzeitverlängerung behandelt werden können. Damit sind auch Schnittebenenverfahren mit diesem Algorithmus realisierbar.

Rekursive Algorithmen zur mehrstufigen stochastischen Optimierung

Bearbeitet von: Marc Steinbach

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

Dieses Projekt verfolgt einen neuen Ansatz zur Lösung sehr großer mehrstufiger stochastischer Optimierungsprobleme, der besonders für (konvexe) nichtlineare Probleme geeignet erscheint. Der Zugang verallgemeinert bereits bestehende Algorithmen, die sich in der nichtlinearen optimalen Steuerung als sehr effizient erwiesen haben [7, 10].

Die üblichen primalen und dualen Dekompositionsmethoden zerlegen das mehrstufige Optimierungsproblem in kleinere Optimierungsprobleme, die den Knoten oder Pfaden des Szenario-Baumes zugeordnet sind. Die entstehenden vertikalen

oder horizontalen Kopplungsbedingungen werden iterativ behandelt, wobei in jeder Iteration die lokalen Probleme unabhängig gelöst werden.

Der neue rekursive 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 und weiterer Nichtlinearitäten wird hier die vertikale und horizontale Kopplung der einzelnen Knoten stets explizit berücksichtigt [8]. Eine erhebliche Beschleunigung der Konvergenz wird erreicht durch eine Warm-Start-Technik, die zunächst eine grobe Approximation des Problems löst und den Szenario-Baum dann sukzessive verfeinert [9].

Der Algorithmus ist als Klassenbibliothek in C++ implementiert und wurde bereits erfolgreich zur Lösung konvex-quadratischer finanzmathematischer Probleme mit mehreren hunderttausend Variablen eingesetzt. Eine kommerzielle Implementierung ist weitgehend fertiggestellt; im Januar 1999 sollen erste Praxistests im Portfoliomanagement einer Versicherungsgesellschaft beginnen.

Publikationen

- [1] Ch. Helmberg, *Fixing variables in semidefinite relaxations*, Algorithms – ESA'97 (Rainer Burkard und Gerhard Woeginger, Ed.), Lecture Notes in Computer Science, Band 1284, Springer, September 1997, 259–270.
- [2] Ch. Helmberg, K. C. Kiwiel und F. Rendl, *Incorporating inequality constraints in the spectral bundle method*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (R. E. Bixby, E. A. Boyd, and R. Z. Ríos-Mercado, Ed.), Lecture Notes in Computer Science, Band 1412, Springer, Juni 1998, 423–435.
- [3] Ch. Helmberg und F. Rendl, *Solving quadratic (0,1)-problems by semidefinite programs and cutting planes*, Math. Programming **82** (1998), Nr. 3, 291–315.
- [4] ———, *A spectral bundle method for semidefinite programming*, Preprint SC 97–37, ZIB, 1997, erscheint in SIAM J. Optim.
- [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, Ed.), Lecture Notes in Computer Science, Band 1084, Springer, Juni 1996, 175–189.

- [7] M. C. Steinbach, *Structured interior point SQP methods in optimal control*, Z. Angew. Math. Mech. **76** (1996), Nr. S3, 59–62.
- [8] ———, *Recursive direct algorithms for multistage stochastic programs in financial engineering*, Preprint SC 98–23, ZIB, 1998. Erscheint in Operations Research — Ongoing Progress (P. Kall und H.-J. Lüthi, Hrsg.), Springer Verlag, S. 236–245.
- [9] ———, *Recursive direct optimization and successive refinement in multistage stochastic programs*, Preprint SC 98–27, ZIB, 1998.
- [10] M. C. Steinbach, H. G. Bock, G. V. Kostin und R. W. Longman, *Mathematical optimization in robotics: Towards automated high speed motion planning*, Surv. Math. Ind. **7** (1998), Nr. 4, 303–340.

2.2.11 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 sieben Projekten im Bereich Telekommunikation. Fünf der Aufgabenstellungen kommen aus der Netzwerkdimensionierung und zwei aus der Frequenzplanung.

Performance-Analyse eines Fair Share Schedulers

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin), Siemens AG (München)

Bei Telekommunikationssystemen tritt die Situation auf, daß verschiedene Prozesse durch einen gemeinsamen Prozessor bedient werden. In einem solchen Fall übernimmt ein Scheduler die Steuerung des Prozessors, wobei der Scheduler nach gewissen Regeln den verschiedenen Prozessen Prozessorzeiten zuteilt, vgl. [7, 8]. Für den Fall eines meldungsverarbeitenden Prozesses (MVP) mit höherer Priorität und eines Batch-Prozesses (BAP) wurde das folgende Modell untersucht:

Der Prozessor entspricht einem Bediengerät (single server) mit der Bediengeschwindigkeit 1, das zu jedem Zeitpunkt nur einen Prozeß bedienen kann. Der MVP bildet einen Poisson Prozeß von Forderungen an den Prozessor, deren Bedienzeiten exponentialverteilt sind. Für den MVP besteht eine Warteschlange

unendlicher Kapazität. Neben dem MVP gibt es einen BAP, der einen unendlich großen Bedienbedarf hat. Der MVP hat eine höhere Priorität als der BAP.

Zu jedem Zeitpunkt ist dem MVP ein (Zeit-) Budget zugeordnet. Die Zeitachse ist in Budget Perioden gleicher Dauer unterteilt. Zu Beginn einer jeden Budget Periode wird dem MVP ein festes (Anfangs-) Budget zugeordnet. Innerhalb der Budget Perioden haben wir folgende Dynamik: Ist das Budget positiv und sind Forderungen im System, so wird der MVP bedient. Findet eine von außerhalb ankommende Forderung keine Forderungen im System vor und ist das Budget positiv, so beginnt der Prozessor augenblicklich mit der Bedienung der neu angekommenen Forderung. Zu jedem Zeitpunkt wird geprüft, ob das Budget noch positiv ist. Ist es nicht positiv, so wird die Bearbeitung einer sich zu diesem Zeitpunkt eventuell noch in Bedienung befindenden Forderung unterbrochen und mit Beginn der nächsten Budget Periode fortgesetzt. Wird keine Forderung bedient, so wird der BAP bedient. Während der Bedienung des MVP fällt das Budget linear mit der Geschwindigkeit 1, sonst ist das Budget konstant.

Für das stabile System wurde ein unendliches lineares Gleichungssystem für die stationäre Verteilung der Anzahl der Forderungen im System zu Beginn der Budget Perioden aufgestellt, dessen Koeffizienten sich durch modifizierte Bessel-Funktionen ganzer Ordnung darstellen lassen. Dieses Gleichungssystem läßt sich nach Finitisierung iterativ numerisch lösen. Aus seiner Lösung ergeben sich auch die zeit-stationäre Verteilung der Anzahl der Forderungen und über die Little-Formel die mittlere Verweilzeit der Forderungen im System.

Approximation von Forderungsströmen in Systemen mit selektiver Trunk-Reservation

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt-Universität zu Berlin), Siemens AG (München)

Kommunikationsnetze enthalten zunehmend Links mit einer Trunk-Reservation (TR) Zulassungsstrategie, vgl. [9]. Die TR Strategie ist eine leicht zu implementierende und robuste Zulassungsstrategie, mit der Ströme priorisiert werden und Netzinstabilitäten, wie sie durch ausuferndes Routing bei hohen Netzbelastungen auftreten, verhindert werden können. Für die verschiedenen Verkehrsströme sind die TR Levels (Parameter) so zu bestimmen, daß eine vorgegebene Quality of Service für ein Netz garantiert werden kann und eine möglichst gute Auslastung des Netzes gewährleistet ist. Für die Entwicklung von Tools zur Dimensionierung von Netzen mit TR Links sind sehr schnelle und numerisch stabile Algorithmen zur Berechnung von Performance-Maßen für Links mit TR notwendig.

Da die Verkehrsströme in einem Kommunikationsnetz – außer den Direktverkehren – nicht gut durch Poissonsche Ströme approximierbar sind, besteht das Problem der Modellierung dieser Ströme. Die Verkehrsströme wurden durch spe-

zielle Erneuerungsprozesse modelliert, die Ströme aus dem praktisch relevanten Bereich von Mean und Peakedness abdecken. Im Fall einer Peakedness größer als 1 ergeben sich die interrupted Poisson Prozesse, die Überlaufströme bekanntlich gut approximieren, vgl. [11].

Geht man davon aus, daß alle Pakete, die an einem Link eintreffen, Direkt-, Zweit- oder Drittwegeverkehre sind, so ist es naheliegend, diese in zwei Ströme mit unterschiedlichen Prioritäten (TR Levels) zusammenzufassen. Dies führt auf die Untersuchung von TR Links mit zwei Verkehrsströmen.

Für TR Links mit zwei Eingangsströmen wurden schnelle und numerisch stabile Algorithmen zur Berechnung des Means und der Peakedness der individuellen carried Traffics und des kumulativen Überlaufstroms entwickelt und implementiert.

Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)

Bearbeitet von: Andreas Bley, Martin Grötschel, Thorsten Koch, Alexander Martin, Roland Wessälly

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

Das Kernziel des Projektes „Optimierung des G-WiN“ ist die Entwicklung von mathematischen Modellen und algorithmischen Methoden zur Kostenoptimierung des G-WiN in der Planungsphase und im Betrieb.

Das Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN soll im Frühjahr 2000 das Breitband Wissenschaftsnetz B-WiN des DFN Vereins ablösen. Im Gegensatz zum B-WiN, bei dem zur Zeit maximale Datenübertragungsraten bis zu 155 MBit/s möglich sind, werden auf den Strecken im Backbone des G-WiN voraussichtlich Übertragungsraten in Vielfachen von 2.4 GBit/s möglich sein. Mit über 700000 Endnutzern in ca. 400 Einrichtungen ist bereits das B-WiN eines der größten privaten Hochgeschwindigkeitsnetze der Welt.

Für eine gegebene Menge an Einrichtungen, eine Menge an potentiellen Kernnetz-knoten sowie gegebene (prognostizierten) Verkehrswerte sind die Netztopologie, die Abschnittskapazitäten und die einzelnen Routingwege so zu bestimmen, daß die Gesamtnetzkosten minimal sind. Im Gegensatz zur Betriebsoptimierung des B-WiN (siehe [5]) sind dabei nicht nur die Kosten des Kernnetzes, sondern auch die des Zuleitungsnetzes sowie der möglichen Routerhardware zu berücksichtigen.

Für die Planungsphase des G-WiN sind ferner auch die Standorte der Kernnetz-knoten bei der Optimierung als variabel anzusehen. Das Problem der Auswahl der geeigneten Kernnetz-knoten aus der Menge der potentiellen Kernnetz-knoten ist auch im Hinblick auf die „Annäherung an die Tarifeinheit im Raum“ wichtig.

Im Rahmen dieses Projektes sollen außerdem bis zur Einführung des G-WiN die bisherigen Methoden zur „Topologie-, Routing- und Kapazitätsplanung für das

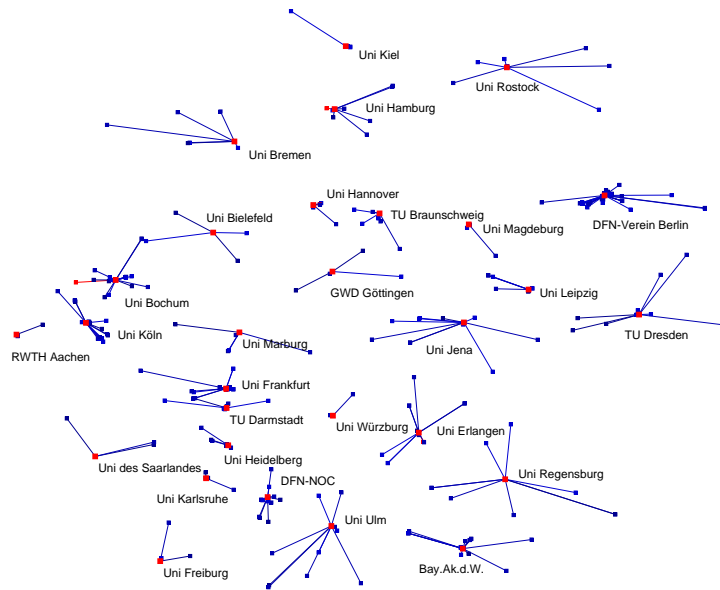


ABBILDUNG 2.29: Beispiel für eine mögliche Auswahl von 28 Kernnetz-knoten und eine potentielle Zuordnung von 334 Nutzeranschlüssen an diese Kernnetz-knoten.

B-WiN“ gemäß den sich verändernden technischen Anforderungen im B-WiN weiterentwickelt werden.

Das Projekt besteht aus den folgenden drei Arbeitspaketen:

AP1 Betriebsoptimierung des B-WiN

Dieser Schwerpunkt umfaßt die Weiterentwicklung der bisher entwickelten Methoden zur „Topologie-, Routing- und Kapazitätsplanung für das B-WiN“ bei sich ändernden technischen Randbedingungen und die Unterstützung bei der Betriebsplanung des B-WiN durch regelmäßige Nachoptimierung des Netzes für die sich verändernden Verkehrsdaten.

AP2 Clustering

Entwicklung eines mathematischen Modells und algorithmischer Methoden zur Auswahl der Kernnetz-knoten (Points of Presence, POPs) und der Zuordnung der Nutzeranschlüsse zu diesen Kernnetz-knoten im G-WiN. Für gegebene Verkehrsdaten sowie kapazitäts- und längenabhängige Abschnittskosten zwischen allen Knotenpaaren im Kernnetz und im Zuleitungsnetz sollen hierbei eine Menge an POPs ausgewählt werden und jeder Nutzerknoten gemäß den technischen und geographischen Nebenbedingungen an einen dieser POPs angeschlossen werden. Dabei sind die (approximierten) Kosten für das Gesamtnetz (Zuleitungs- und Kernnetz) zu minimieren.

AP3 Netzoptimierung

Der dritte Schwerpunkt beinhaltet die Entwicklung von Modellen und Me-

thoden zur Kostenoptimierung des Kernnetzes (zwischen den POPs) und der Zuleitungsnetze des G-WiN. Die hier berechneten Netze sollen ein hohes Maß an Ausfallsicherheit bieten. Für das Kernnetz heißt das, daß die Kapazitäten so zu wählen sind, daß selbst beim Ausfall einzelner Netzwerkkomponenten noch ein festgelegter Minimalanteil aller Verkehrsanforderungen auf Alternativwegen im Netz geroutet werden kann. Das Zuleitungsnetz ist so auszulegen, daß der Fehler einer Verbindung oder eines Knotens nie mehr als eine einzelne Einrichtung vom Netz trennt.

Basierend auf den Erfahrungen bei der Optimierung des B-WiN müssen neue Modelle und Algorithmen zur Kernnetzoptimierung und zur Vernetzung innerhalb der Cluster (POP und alle angebundenen Nutzeranschlüsse) entwickelt werden, die die veränderten technischen Nebenbedingungen und Kapazitäts-/Kostenstrukturen im Gigabitbereich besser berücksichtigen.

Kostengünstige Planung eines Telefonnetzes

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Hermann Stolle

Kooperationspartner: Siemens AG (München)

Bei der Planung eines Telefonnetzes in einer Stadt tritt das Unterproblem auf, Bereichsverteiler und Endverteiler mit einem Netz aus Kabeln, Verzweigern und Multiplexern zu verbinden. Die Verteiler befinden sich in Gebäuden. Die Kabel sind in Tiefbautrassen zu verlegen. Die Tiefbauabschnitte für die Kabel verlaufen entlang von Straßen und, nur zu Straßenüberquerungen und zur Anbindung von Verteilern, senkrecht zum Straßenverlauf. Die Multiplexer und die Endverteiler werden von den Bereichsverteilern aus mit Betriebsspannung versorgt. Daher gelten Längenbeschränkungen für die Versorgungskabel. Dies führt zu Längenbeschränkungen für den Trassenabstand der Bereichsverteiler zu den Endverteilern. Die Planung des Telefonnetzes soll durch automatische Verfahren unterstützt werden. Dazu wird zuerst ein Tiefbaunetz entworfen. Nachfolgend werden die Verzweiger und Multiplexer in dem Tiefbaunetz positioniert und diese mit Kabeln verbunden. In diesem Projekt werden Verfahren für den kostengünstigen Entwurf des Tiefbaunetzes untersucht.

Die Zielfunktion für einen solchen Entwurf wurde mit Rücksicht auf die nachfolgenden Planungsschritte festgelegt. In die Zielfunktion fließen Kosten für die Tiefbauarbeiten und Kosten für die Trassenabstände der Endverteiler zu den Bereichsverteilern ein. Die Kosten für die Trassenabstände werden nach dem Ermessen des Planers festgesetzt. Sie können sich zum Beispiel an den zu erwartenden Kosten für die Verbindungskabel orientieren.

Wir modellieren das Problem in einem Graphen. Die Knoten des Graphen sind die Bereichsverteiler, die Endverteiler und die Punkte, an denen mögliche Tiefbauabschnitte zusammenstoßen. Die Kanten des Graphen sind die möglichen

Tiefbauabschnitte. Die Auswahl einer Kante entspricht dem Ausheben des Tiefbauabschnitts. Der Trassenabstand eines Endverteilers zu den Bereichsverteiltern wird repräsentiert durch den kürzesten Weg über ausgewählte Kanten von irgendeinem Bereichsverteiler zu dem Endverteiler. Wir führen Kantenkosten und Kostenfaktoren für den Trassenabstand der Endverteiler ein. Das Ziel ist, die Summe der Kosten für die ausgewählten Kanten und der Kosten für die Trassenabstände der Endverteiler zu minimieren. Dieses in einem ungerichteten Graphen formulierte Optimierungsproblem transformieren wir auf eines in einem gerichteten Graphen. Beide Optimierungsprobleme sind NP-schwer. Für das Optimierungsproblem in gerichteten Graphen stellen wir ein binäres Mehrgüter-Fluß-Programm in Pfaddarstellung auf. Zur Lösung dieses binären Programms kommen Problemreduktionen, primale und duale Greedy-Heuristiken, Lagrange-Heuristiken und Schnittebenenverfahren zum Einsatz. Durch die Kombination dieser Verfahren gelingt es, optimale Lösungen für Beispiele aus der Praxis zu berechnen oder den Optimalwert einer Lösung bis auf wenige Prozent einzugrenzen.

Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Roland Wessälly

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 [4].

Zur Dimensionierung des Festnetzes zwischen den Vermittlungszentralen von

E-Plus wurden primale Heuristiken und ein Schnittebenenverfahren (siehe [1, 2, 3]) 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.

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 den 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 nutzen jeweils den Kanal des Transceivers, 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 (*dicht* heißt im Regelfall die Verwendung desselben oder eines benachbarten Kanals).

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. Die Anzahl der Transceiver übersteigt die der verfügbaren Kanäle in der Regel um den Faktor 50 und mehr. Zwingend müssen also Kanäle mehrfach verwendet werden. Um die Nutzung der Kanäle sinnvoll planen zu können, wird durch aufwendige Interferenzprädiktionen oder Meßfahrten ermittelt, welche Transceiver sich gegebenenfalls stören.

Dieses Projekt läuft seit September 1995. Es hat die Entwicklung von Verfahren zur automatischen Erstellung von Frequenzplänen zum Ziel. Zunächst standen der Entwurf und die Implementierung von schnellen *primalen Heuristiken* zur Berechnung interferenzarmer Zuweisungen im Mittelpunkt. Im Vergleich zu den bisher genutzten Verfahren konnten deutliche Verbesserungen erzielt werden

[6], siehe Abbildung 2.30. Ein Teil der Verfahren ist seit längerem bei der E-Plus Mobilfunk GmbH im praktischen Einsatz und hat sich dort bewährt [10]. Derzeit wird daran gearbeitet, die Verfahren besser an die praktischen Planungsbedürfnisse anzupassen. So ist häufig nur ein kleiner Netzausschnitt neu zu planen bzw. dieser Ausschnitt zuvor noch geeignet festzulegen. Außerdem werden weiterhin Verfahren entwickelt, mit denen die mindestens auftretende Interferenz nach unten abgeschätzt werden kann.

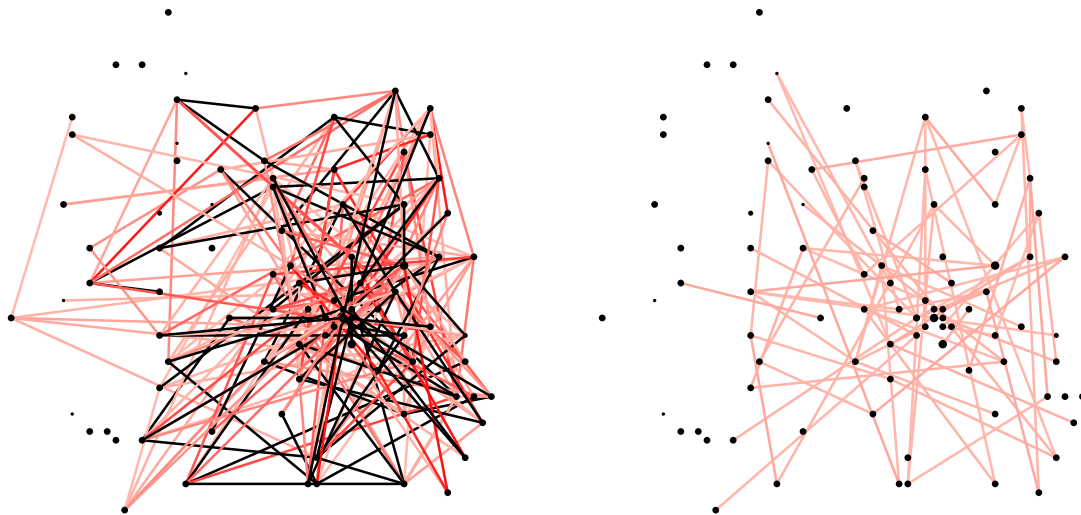


ABBILDUNG 2.30: Beide Abbildungen stellen die Interferenz für jeweils einen Frequenzplan für dasselbe Planungsgebiet dar. Die schwarzen Punkte repräsentieren Transceiverstandorte. Stören sich zwei Transceiver bei der Verwendung der geplanten Kanäle, so ist eine Linie zwischen den entsprechenden Punkten eingezeichnet. Die Linie ist umso dunkler, je stärker die Interferenz ist. Auf der linken Seite liegt ein Frequenzplan zugrunde, der mit einem kommerziellen Planungsprogramm erstellt wurde. Der der rechten Abbildungen zugrundeliegende Plan wurde mit den entwickelten Methoden binnen Sekunden erstellt. Die verursachte Interferenz beträgt lediglich 4,2% des Vergleichswertes.

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 Punkt-zu-Mehrpunkt-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 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 Radiofrequenzspektrum zugewiesen werden. Dabei sind alle Interferenzbeziehungen, einige technische Nebenbedingungen und der Kommunikationsbedarf der einzelnen Kunden zu berücksichtigen.

Das Frequenzzuweisungsproblem kann als neuartiges Schedulingproblem modelliert werden. Für diese Art von Schedulingproblemen sind noch keine theoretischen Ergebnisse oder anwendbaren Algorithmen bekannt. In der bisherigen Projektlaufzeit wurden umfangreiche Datenstrukturen und *primale Start- und Verbesserungsheuristiken* entworfen und implementiert. Zur Bewertung der Lösungen stehen verschiedene Zulässigkeitstests und eine *duale Heuristik* zur Verfügung. Der Test der implementierten Heuristiken war bisher aufgrund fehlender realistischer Problembeispiele nur eingeschränkt möglich. Die Entwicklung *exakter Verfahren* und weiterer Heuristiken ist geplant.

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 alle Interferenzbeziehungen zwischen allen Kunden der einzelnen Sektoren zu berücksichtigen. Das Broadcastproblem kann als Graphenfärbungsproblem modelliert werden. Mehrere Heuristiken und ein exaktes Verfahren wurden implementiert.

Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel, P. Jonas, U. Paul und R. Wessäly. Survivable mobile phone network architectures: Models and solution methods. *IEEE Communications Magazine*, 36:88–93, 1998.
- [2] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly. A network dimensioning tool. Preprint SC 96–49, ZIB, 1996.
- [3] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly. Cost-efficient network synthesis from leased lines. *Annals of Operations Research*, 76:1–20, 1998.
- [4] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly. Capacity and survivability models for telecommunication networks. Preprint SC 97–24, ZIB, 1997.
- [5] A. Bley, M. Grötschel und R. Wessäly. *Design of Broadband Virtual Private Networks: Model and Heuristics for the B-WiN*, Preprint SC 98–13, ZIB, 1998.

-
- [6] R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin. *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*, Annals of Operations Research **76** (1998), 73–93.
- [7] A. Brandt und M. Brandt. *A note on the stability of the many-queue head-of-the-line processor-sharing system with permanent customers*, Preprint SC 96–55, ZIB, 1996.
- [8] A. Brandt und M. Brandt. *On the sojourn times for many-queue head-of-the-line processor-sharing systems with permanent customers*, Math. Meth. Operations Research **47**, Nr. 2 (1998), 181–220.
- [9] A. Brandt und M. Brandt. *Approximation for overflow moments of a multiservice link with trunk reservation*, erhältlich via WWW unter der URL: <http://www.wiwi.hu-berlin.de/or/preprints/forschung.shtml>
- [10] A. Eisenblätter, T. Kürner und R. Fauß. *Radio planning algorithms for interference reduction in cellular networks*, Communications for the Millennium. COST 252/259 Joint Workshop, University of Bradford, 21–22 April 1998, 1998, 87–92.
- [11] A. Kuczura. *The interrupted Poisson process as an overflow process*, Bell Sys. Tech. J. **52**, Nr. 3 (1973), 437–448.

2.2.12 Ganzzahlige Optimierung

Im Mittelpunkt dieses Schwerpunkts steht die Lösung ganzzahliger Optimierungsprobleme. Viele praktische Fragestellungen aus Wirtschaft, Gesellschaft und Technik können als ganzzahlige Optimierungsprobleme formuliert werden, vgl. dazu auch die Schwerpunkte Verkehr und Telekommunikation. Daher sind neue Kenntnisse über die Lösung derartiger Probleme von großer Bedeutung.

Zu den erfolgreichsten und bewährtesten Methoden zur Lösung ganzzahliger Optimierungsprobleme gehören Schnittebenenverfahren. Die Idee ist, die LP-Relaxierung eines Problems durch iteratives Hinzufügen von Ungleichungen zu verschärfen und damit optimale oder beweisbar gute Lösungen zu finden. Dieser Ansatz erfordert das Studium der assoziierten Polyeder sowie das Auffinden separierbarer Ungleichungen. In den letzten Jahren zeichnet sich auf diesem Gebiet der Forschung der Trend ab, die an speziell strukturierten Problemen gewonnenen Erkenntnisse zu verallgemeinern und auf weitere gegebenenfalls allgemeinere Problemklassen zu erweitern. In den ersten beiden Projekten, kombinatorische Relaxierungen und gemischt-ganzzahlige Programmierung, wurde genau dieses Ziel verfolgt. Im dritten Projekt geht es um die Gewinnung neuer Erkenntnisse eines speziell strukturierten Problems, das bei der Auftragsplanung der Firma Herlitz PBS AG auftritt.

Kombinatorische Relaxierungen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer

Kooperationspartner: Robert Weismantel (Universität Magdeburg)

Die Konstruktion von Group-, Lagrange-, LP-, semidefiniten etc. *Relaxierungen* ist ein Ansatz zur Auseinandersetzung mit der Komplexität der ganzzahligen Programmierung. Solche Relaxierungen können die Basis einer theoretischen Untersuchung bilden. Und, vielleicht noch wichtiger, sie können auch zur rechnerischen Lösung ganzzahliger Programme beitragen.

Wir untersuchen in diesem Projekt eine neue Klasse von LP-Relaxierungen. Bei unseren *kombinatorischen Relaxierungen* konzentrieren wir uns im Moment auf kombinatorische Optimierungsprobleme (daher der Name). Die Idee besteht darin, eine polyedrische Einbettung eines solchen Problems in ein Referenzproblem zu konstruieren. Mit einer solchen Einbettung lassen sich dann Kenntnisse und Algorithmen für das Referenzproblem auf die Ausgangsaufgabe übertragen.

Beispiele für diese Methodik sind Relaxierungen in Form von Set-Packing-Problemen, siehe [4]. Es zeigt sich, daß man eine Reihe von bekannten Ungleichungen aus der polyedrischen Kombinatorik als Kreis-, Cliques-, etc. Ungleichungen geeigneter Set-Packing-Relaxierungen erklären kann. Diese Konzepte führen in den meisten Fällen zu Verallgemeinerungen. “Automatisch” liefert die Relaxierung dabei algorithmische Resultate mit. So konnte etwa mit einer Darstellung der Möbius-Leiter-Ungleichungen für das Lineare Ordnungspolytop als ein “Kreis von gerichteten Pfaden” (siehe Abbildung 2.31) erstmals ein polynomiales Separierungsverfahren für eine große Klasse von Möbius-Leitern, die gerichtete Kreise beliebiger Länge enthalten, entwickelt werden. Weitere Beispiele kombinatorischer Relaxierungen, wie etwa Knapsack-Relaxierungen, werden in [3] diskutiert.

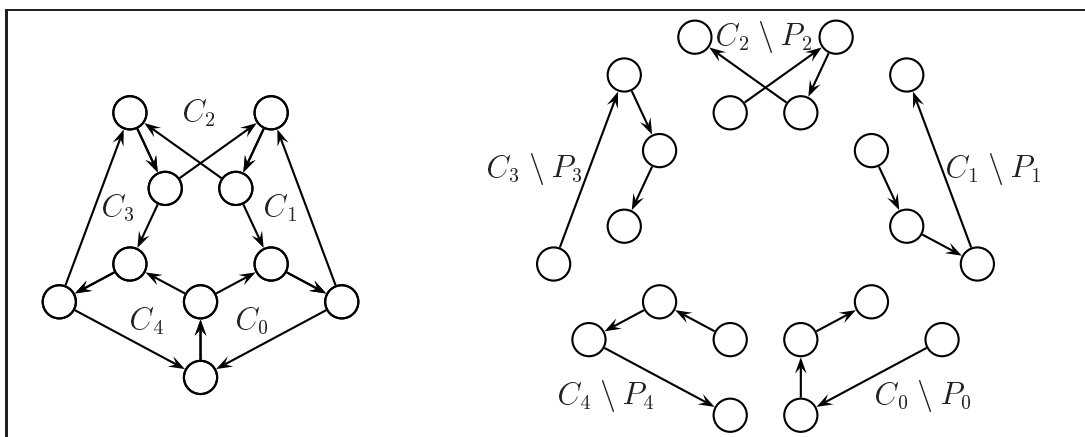


ABBILDUNG 2.31: Eine Möbius-Leiter als Kreis von gerichteten Pfaden.

Kombinatorische Relaxierungen sind aber nicht nur theoretische Werkzeuge. Sie lassen sich auch praktisch nutzen. Für eine Anwendung bei der Lösung von großen Set-Partitioning-Problemen in der Fahrzeugeinsatzplanung haben wir die Technik in einer Pilotversion erfolgreich eingesetzt, siehe [1].

Gemischt-Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Alexander Martin

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

Ziel dieses Projekts ist die Lösung allgemeiner gemischt-ganzzahliger Programme, das heißt eine bezüglich einer linearen Zielfunktion optimale Lösung unter linearen Nebenbedingungen zu finden, wobei manche oder alle Variablen ganzzahlig sein müssen.

Eine erste Schwierigkeit bei der Lösung derartiger Probleme besteht darin, daß man als Input nur die Zielfunktion c und das System von Nebenbedingungen $Ax \leq b$ erhält, jedoch nichts über das Originalproblem, das zu diesem ganzzahligen Programm führte, weiß. Folglich ist ein erster Schritt, die Nebenbedingungsmatrix A auf bekannte Strukturen hin zu untersuchen und diese Kenntnisse algorithmisch auszunutzen. Wir haben uns in diesem Zusammenhang mit der Frage beschäftigt, ob die Nebenbedingungsmatrix A nach Entfernen möglichst weniger Zeilen durch Spalten- und Zeilenpermutationen in Blockdiagonalform gebracht werden kann, vgl. Abbildung 2.32. Es zeigt sich, daß dies tatsächlich für viele praxisrelevante Probleme der Fall ist, siehe [2, 6].

In einem zweiten Schritt haben wir eine neue Familie von Ungleichungen, die Blockstruktur ausnutzt, entwickelt. Diese Feasible-Set Ungleichungen verallgemeinern viele bekannte Klassen von Ungleichungen für das Rucksack-Problem oder das Set-Packing Problem. Die algorithmische Umsetzung hat gezeigt, daß damit signifikante Verbesserungen erzielt werden können, siehe [7].

Diese Ungleichungen sind Bestandteil des Programmpakets **SIP** zur Lösung allgemein gemischt-ganzzahliger Programme. Schwerpunkte bei der Weiterentwicklung dieser Software bildeten eine effiziente Implementierung einzelner Komponenten sowie Erweiterungen um verschiedene Lösungsstrategien. Unsere Rechenergebnisse bestätigen, daß **SIP** zu den leistungsfähigsten Systemen zur Lösung ganzzahliger Programme gehört und derzeit konkurrenzfähig zu marktführenden kommerziellen Anbietern ist, siehe [6].

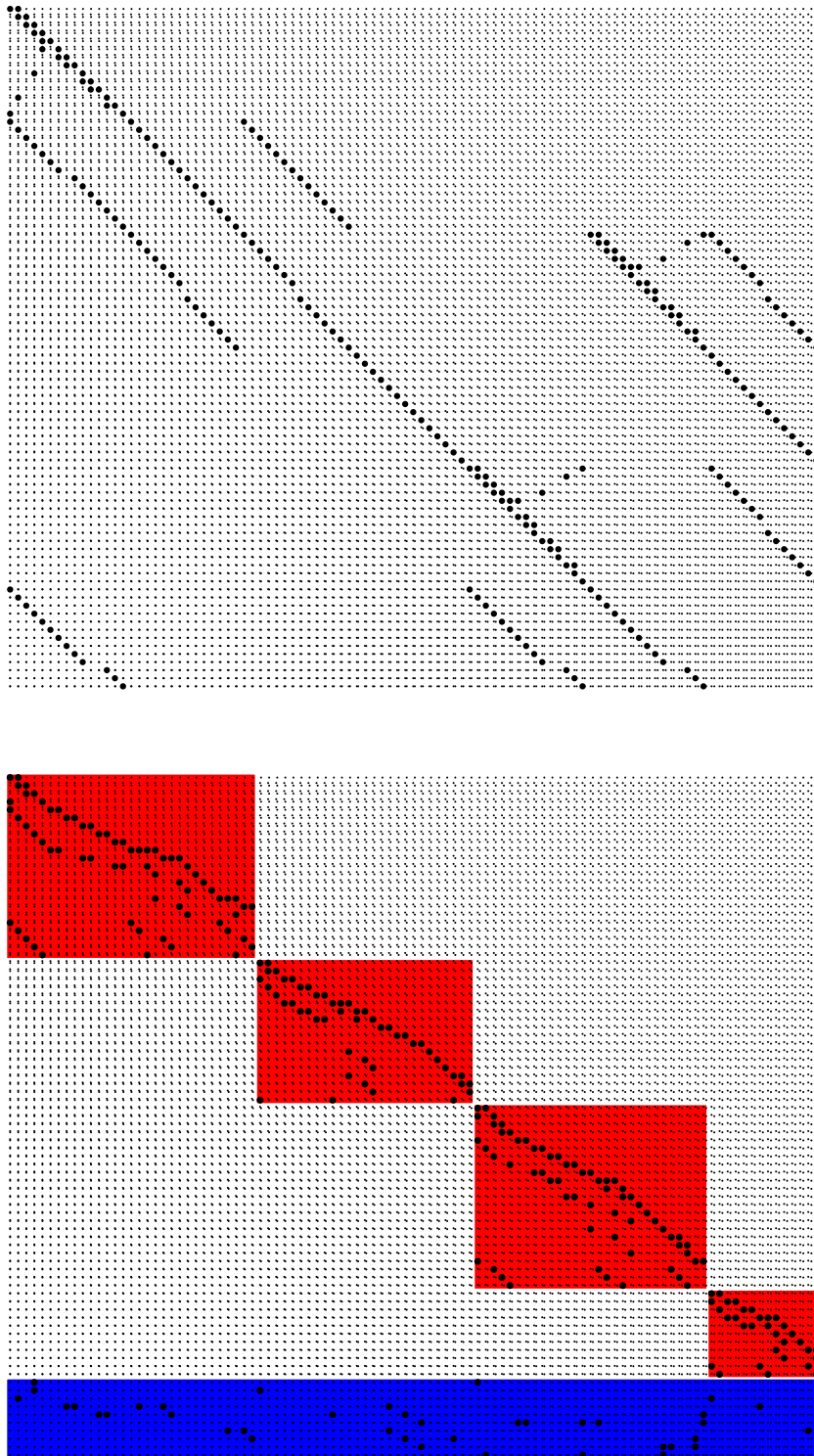


ABBILDUNG 2.32: Nebenbedingungsmatrix eines ganzzahligen Programms im Originalzustand und in Blockdiagonalform (nach Zeilen- und Spaltenpermutationen)

Auftragsplanung für nicht identische Maschinen mit hohen Rüstkosten**Bearbeitet von:** Norbert Ascheuer, Christoph Helmberg**Kooperationspartner:** Herlitz PBS AG (Berlin)

In Kooperation mit der Firma Herlitz PBS AG wurde ein Auftragsplanungsproblem im Fertigungsbereich Rotationsdruck-Geschenkpapier analysiert und mathematisch modelliert. Für dieses Modell wurde ein Optimierungsverfahren entwickelt, das nun in der Praxis getestet werden soll.

Problembeschreibung. Mittels zweier Rotationsdruckmaschinen wird bei der Firma Herlitz PBS AG Geschenkpapier hergestellt. Auf einer Maschine durchläuft die Materialbahn hintereinander bis zu sechs Druckwerke, so daß bis zu sechs Farben in Lasurtechnik auf das Material gedruckt werden können. Ein Auftrag bestimmt sich durch die zu verwendenden Druckwalzen, die in vorgegebener Reihenfolge einzubauen sind, die zugehörigen Farben, Materialdaten (Art und Breite), möglicherweise Rückseitendruck auf der letzten Druckwalze sowie der Laufmeterangabe. Die Maschinen unterscheiden sich bezüglich Druckgeschwindigkeit, zulässiger Materialien und der Möglichkeit, auch die Rückseite des Materials zu bedrucken. Aufträge, die dieselben Druckwalzen benötigen, können nicht gleichzeitig auf beiden Maschinen abgearbeitet werden. Das Umrüsten der Maschinen ist ein aufwendiger Prozeß, der für Aufträge mit geringer Laufmeterzahl bereits die reine Druckzeit übertreffen kann. Die Rüstzeiten hängen wesentlich von der Reihenfolge ab, in der die Aufträge abgearbeitet werden: Materialwechsel, Breitenwechsel, Motivwechsel sowie starke Farbänderungen verursachen höheren Aufwand. Die Festlegung erlaubter Farbübergänge ist eine auf Erfahrung basierende subjektive Entscheidung, zur Modellierung werden die erforderlichen Daten sukzessive in ein Expertensystem integriert. Die Aufgabe besteht nun darin, für eine gegebene Auftragsmenge eine Zuteilung auf die Maschinen und eine Abarbeitungsreihenfolge so zu bestimmen, daß der letzte Auftrag möglichst früh fertiggestellt wird.

Mathematische Modellierung. Die Rüstzeiten von einem Maschinenzustand in einen anderen werden anhand eines detailliert ausgearbeiteten Verfahrens ermittelt. In der mathematischen Modellierung identifizieren wir Aufträge mit gewissen Standardmaschinenzuständen. Die Zeit von Fertigstellung eines Vorgängerauftrags bis zur Fertigstellung eines Nachfolgers bestimmt sich aus den Rüstzeiten vom vorhergehenden zum nachfolgenden Maschinenzustand und der Druckzeit des nachfolgenden Auftrags. Mit diesen Übergangszeiten stellt sich das Problem als asymmetrisches Multi-Traveling-Salesmen-Problem (m-ATSP) mit unterschiedlichen Übergangskosten pro Maschine und konvexer, stückweise linearer Zielfunktion dar.

Lösungsverfahren. Zur exakten Lösung des m-ATSP Problems entwickelten wir in [5] ein Branch & Cut Verfahren, das zur Erzeugung guter Lösungen auf bereits vorhandene exakte ATSP Verfahren zurückgreift. Die grundlegende Relaxierung

konnte maßgeblich durch die Entwicklung eines polynomialen exakten Separators für eine "neue" Klasse von Facetten des m -ATSP Polytops, den sogenannten v_0 -Schnitt-Ungleichungen, verbessert werden. Die v_0 -Schnitt-Ungleichungen entsprechen den modifizierten Kurzzyklus-Ungleichungen des Prize-Collecting-ATSP, das mit dem Ein-Maschinen-Unterproblem des m -ATSP eng verwandt ist. Darüber hinaus konnten wir zeigen, daß für mehr als zwei Maschinen alle facettendefinierenden Ungleichungen des Ein-Maschinen-Unterproblems direkt zu facettendefinierenden Ungleichungen des m -ATSP führen.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998. Erschienen im Shaker Verlag, Aachen, 1998.
- [2] R. Borndörfer, C.E. Ferreira und A. Martin, *Decomposing matrices into blocks*, SIAM J. on Opt. **9** (1998), Nr. 1, 236–269.
- [3] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Relations Among Some Combinatorial Programs*, Preprint SC 97–54, ZIB, 1997.
- [4] ———, *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*, Preprint SC 97–30, ZIB, 1997.
- [5] Ch. Helmberg, *The m -Cost ATSP*, erscheint in Integer Programming and Combinatorial Optimization, Proceedings der IPCO '99, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 1999.
- [6] A. Martin, *Integer programs with block structure*, Habilitationsschrift, TU Berlin, 1998.
- [7] A. Martin und R. Weismantel, *The intersection of knapsack polyhedra and extensions*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (R.E. Bixby, E.A. Boyd, and R.Z. Ríos-Mercado, Hsg.), Proceedings of the 6th IPCO Conference, 1998, 243 – 256.

2.2.13 Online-Optimierung

In der klassischen kombinatorischen Optimierung wird davon ausgegangen, daß die Daten jeder Probleminstanz vollständig gegeben sind. Aufbauend auf diesem vollständigen Wissen berechnet dann ein Algorithmus eine optimale (oder approximative) Lösung. In vielen Fällen modelliert diese *Offline-Optimierung* jedoch die Situationen aus Anwendungen nur ungenügend. Zahlreiche Problemstellungen in der Praxis sind in natürlicher Weise *online*: Sie erfordern Entscheidungen, die unmittelbar und ohne Wissen zukünftiger Ereignisse getroffen werden müssen. Beispiele für natürliche Online-Probleme sind das Routing und Verteilen von

Telefongesprächen, die Steuerung von Aufzügen oder das Paging in virtuellen Speichersystemen.

Bei der Online-Optimierung modelliert man die Eingabedaten als Anfrage-Sequenz $\sigma = (r_1, \dots, r_m)$. Ein Online-Algorithmus muß bei Auftreten einer Anfrage r_i diese bearbeiten (oder zur Bearbeitung verplanen), bevor er die nächste Anfrage r_{i+1} erhält. Im allgemeinen fordert man, daß die vom Online-Algorithmus getroffenen Entscheidungen nicht widerrufen werden können (Varianten sind jedoch auch in der Literatur zu finden).

Lange Zeit war offen, wie man die Qualität eines Online-Algorithmus sinnvoll bewertet. Während diese Fragestellung auch jetzt noch nicht für alle Fälle zufriedenstellend gelöst ist, hat sich in den letzten Jahren jedoch die *kompetitive Analyse* (siehe [8, 9]) als ein Standardmittel zur Beurteilung von Online-Algorithmen durchgesetzt. Dabei vergleicht man den Zielfunktionswert $C_A(\sigma)$ einer vom Online-Algorithmus A generierten Lösung bei Eingabe σ mit dem Wert $C_{\text{OPT}}(\sigma)$ einer Offline-Lösung. Der Algorithmus A heißt dann *c-kompetitiv*, wenn es eine Konstante b gibt, so daß für alle Anfrage-Sequenzen σ gilt: $C_A(\sigma) \leq c \cdot C_{\text{OPT}}(\sigma) + b$.

Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Transportsysteme (z. B. Bediengeräte von Hochregallagern, fahrerlose innerbetriebliche Versorgungsfahrzeuge) werden sorgfältig entworfen, damit notwendige Transportaufgaben effizient erledigt werden können. Derartige Systeme sind jedoch auch dadurch gekennzeichnet, daß eine Vorab-Optimierung des operativen Einsatzes in der Regel nicht möglich ist. Während des Systembetriebs entstehen unvorhersagbar neue Transportaufträge, alte werden storniert; Störungen und Staus verändern die Systemeigenschaften. Diese Umstände machen eine Online-Planung erforderlich: unter Echtzeit-Bedingungen müssen gute Entscheidungen zur Abarbeitung der Aufträge getroffen werden.

Ziel des Projekts ist es, praxistaugliche mathematische Modelle für derartige Echtzeit-Aufgaben zu entwerfen, diese Modelle mathematisch zu untersuchen und daraus algorithmische Strategien abzuleiten. Wir konzentrieren uns dabei auf Transportaufgaben, die zu Modellen aus dem Bereich der kombinatorischen Optimierung mit stochastischen Komponenten führen. Wir wollen für einzelne konkrete Transportsysteme echtzeit-taugliche Verfahren entwickeln und implementieren sowie ihre Praxistauglichkeit anhand echter Fallbeispiele in Zusammenarbeit mit Partnern in der Industrie testen.

Mit Hilfe des am Konrad-Zuse-Zentrum entwickelten Simulationspakets AM-

SEL [1] ist langfristig eine Simulation des kompletten Transportsystems des Versandlagers der Herlitz PBS AG angestrebt; damit kann die Qualität der Modelle und Optimierungsverfahren unter Verwendung realer Daten schnell und zuverlässig getestet werden.

Echtzeitsteuerung von Aufzugssystemen

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Die effiziente Steuerung von Aufzugssystemen ist ein Problem, welches in natürlicher Weise Online-Charakter besitzt: Bei Personenbeförderung ist zum Zeitpunkt einer Transportanfrage im allgemeinen unklar, wann die nächste Anfrage erfolgt und welchen Transportauftrag sie enthält. Auch bei Lastaufzügen in Palettenfördertürmen können in der Praxis zukünftige Aufträge in der Regel nicht vorhergesagt werden.

Ein Kennzeichen bei der Steuerung von Aufzugssystemen ist der *Echtzeit-Aspekt*. Bei Auftreten einer neuen Anfrage steht nur eine sehr beschränkte Rechenzeit für die Bestimmung einer neuen Lösung zur Verfügung, und eine Reaktion des Systems auf die neue Situation muß schnell erfolgen, um den Durchsatz im System nicht zu bremsen. Im allgemeinen Fall ist jedoch bereits die Offline-Version des Fahrstuhlsteuerungsproblems NP-schwer [10]. Einfache Spezialfälle konnten hingegen als polynomial lösbar nachgewiesen werden [7, 11, 12]. Durch die Komplexität des allgemeinen Fahrstuhlsteuerungsproblems ergeben sich neben der Online-Problematik weitere Schwierigkeiten für die Erstellung von effizient arbeitenden Algorithmen.

Ziel des Projekts ist es, effiziente Online-Algorithmen zu entwickeln, die sowohl gute theoretische Eigenschaften (u.a. gute Kompetitivität) besitzen als auch praktischen Anforderungen (insbesondere dem Echtzeit-Aspekt) genügen. Dazu sollen auch für die Anwendungen relevante Spezialfälle des Aufzugsteuerungsproblems auf ihre Offline-Komplexität untersucht werden.

Für die Optimierung der Gesamtbearbeitungszeit („makespan“) bei einem Aufzug wurden in der Arbeitsgruppe bereits mehrere Online-Algorithmen entwickelt und bezüglich ihrer Kompetitivität analysiert (siehe [5, 6]). Die bisher besten Algorithmen sind dabei $5/2$ -kompetitiv. Zugleich konnte gezeigt werden, daß kein deterministischer Algorithmus besser als $1 + \sqrt{2}/2 \approx 1.70$ kompetitiv sein kann [6]. Aufbauend auf AMSEL [1] wurde für die Aufzugssysteme ein Simulationssystem entwickelt, mit dem das Verhalten der Algorithmen in praktischen Situationen evaluiert werden kann. Das gute (theoretische) Verhalten der Algorithmen konnte dabei auch in den Simulationsstudien verifiziert werden (Abbildung 2.33 zeigt die

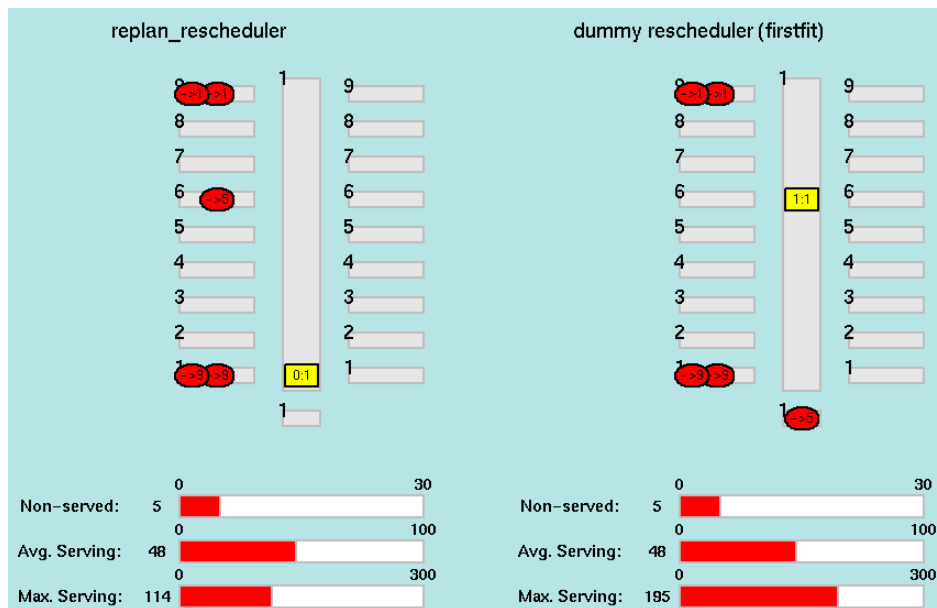


ABBILDUNG 2.33: Bildschirmdarstellung des Simulations Systems für die Aufzugssysteme.

Bildschirmdarstellung im Simulationssystem).

Optimierung von Hochregallagern

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Eine zentrale Komponente des Distributionszentrum der Herlitz PBS AG stellt das Hochregallagersystem (18 Lagergassen mit ca. 4000 Palettenplätzen pro Gasse) dar. Zur effizienten Nutzung des Systems müssen die Bediengeräte alle Ein- und Auslageraufträge “möglichst gut” abarbeiten. Als Zielfunktionen sind z.B. Summe der Leerfahrzeiten oder gewichtete Summe der Wartezeiten bis zur Auftragsabarbeitung denkbar. Aufgrund der unvorhersagbaren Reaktionszeiten des Systems bezüglich Auftragseingang, -beendigung oder -stornierung ist ein Echtzeit-Verfahren erforderlich, welches schnell (manchmal in weniger als einer Sekunde) eine gute Lösung, also eine Fahrauftragszuweisung an das Regalbediengerät, bestimmt. In einem Projekt mit der Siemens-Nixdorf AG [2, 3] wurden Modelle (Asymmetrische Travelling Salesman Probleme mit zusätzlichen Nebenbedingungen, wie z.B. Präzedenzen, Zeitfenster) zum optimalen Routing der Bediengerät entwickelt, die auch bei den Hochregallagern von Herlitz eingesetzt werden sollen. Anhand von realen Produktionsdaten sollen in einer Simulationsumgebung (vgl. Abbildung 2.34) verschiedene Verfahren auf ihre Echtzeit-Tauglichkeit hin untersucht werden. Ziel ist die Entwicklung einer Bibliothek von

Optimierungsverfahren, die auf verschiedensten Hochregallagerarchitekturen eingesetzt werden können.

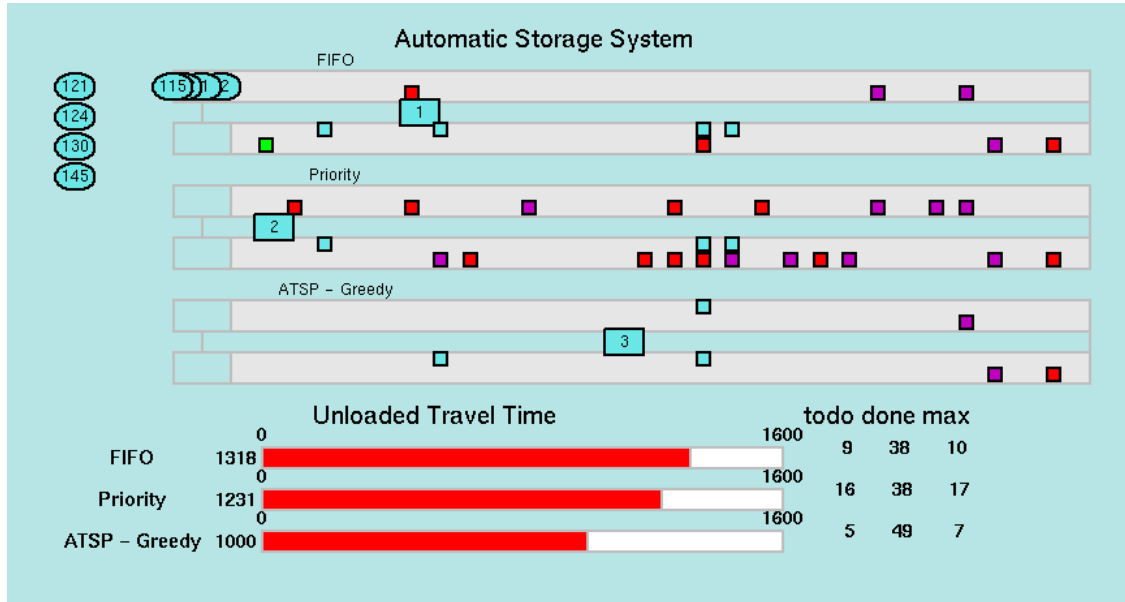


ABBILDUNG 2.34: Vergleich verschiedener Verfahren zur Abarbeitung von Transportaufträgen im AMSEL Simulationsmodell

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*, Dissertation¹, TU Berlin, 1995.
- [3] N. Ascheuer, M. Grötschel und A. Abdel-Aziz Abdel-Hamid, *Order picking in an automatic warehouse: Solving on-line asymmetric TSP's*, Preprint SC 98-08, ZIB, 1998.
- [4] N. Ascheuer, M. Grötschel, N. Kamin und J. Rambau, *Combinatorial online optimization in practice*, Preprint SC 98-07, ZIB, 1998.
- [5] N. Ascheuer, M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Combinatorial on-line optimization*, Proceedings of the International Conference of Operations Research Zürich (OR'98), Springer, 1998.

¹Erhältlich von URL <http://www.zib.de/ZIBbib/Publications/>

- [6] N. Ascheuer, S. O. Krumke und J. Rambau, *The online transportation problem: Competitive scheduling of elevators*, Preprint SC 98–34, ZIB, 1998.
- [7] M. J. Atallah und S. R. Kosaraju, *Efficient solutions to some transportation problems with applications to minimizing robot arm travel*, SIAM Journal on Computing **17** (1988), Nr. 5, 849–869.
- [8] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.
- [9] A. Fiat und G. J. Woeginger (eds.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [10] G. N. Frederickson, *A note on the complexity of a simple transportation problem*, SIAM Journal on Computing **22** (1993), Nr. 1, 57–61.
- [11] G. N. Frederickson und D. J. Guan, *Preemptive ensemble motion planning on a tree*, SIAM Journal on Computing **21** (1992), Nr. 6, 1130–1152.
- [12] D. J. Guan, *Routing a vehicle of capacity greater than one*, Discrete Applied Mathematics **81** (1998), Nr. 1, 41–57.

2.2.14 Verkehr

In der Mobilitätsdiskussion spielen die Begriffe Fahrzeugtechnologie, Netzverdichtung und staatliche Regulierung seit jeher eine prägende Rolle. In jüngster Zeit ist ein weiterer Faktor in das Bewußtsein der Öffentlichkeit gerückt: Die Steuerung und — weitgehender — die *Optimierung* von Transportsystemen. Telematik, Güterverkehrszentren, integrierter InterCity-Taktfahrplan, Airline Fleet- und Crew-Scheduling — das sind Schlagworte in einem Programm zur Steigerung von Attraktivität oder Effizienz in verschiedenen Verkehrssektoren, siehe auch [2]. Ein Bereich, in dem sich der Einsatz von Optimierungsmethoden anbietet, ist der *öffentliche Personennahverkehr* (ÖPNV). Hier besteht vor allem durch die am 01.01.1999 in Kraft getretene Deregulierung nach § 90 des EU-Vertrages Maastricht II Handlungsbedarf. Besonders geeignet ist die operative Planung der Nahverkehrsunternehmen, denn diese Aufgabe ist nichts anderes als ein Optimierungsproblem der Linien-, Fahr-, Fahrzeugumlauf-, Dienst-, Turnus- und Personaleinsatzplanung — allerdings von gigantischer Dimension und enormer Komplexität!

Eine Planungsaufgabe dieser Kategorie kann derzeit niemand in einem Schlag lösen (und wahrscheinlich wird das auf absehbare Zeit unmöglich bleiben). In der Praxis hat sich deshalb eine *hierarchische Planung* in den oben bereits genannten Schritten durchgesetzt, die geeignet aufeinander abgestimmt werden, siehe Abbildung 2.35. Aber selbst die *Einzelaufgaben* der Planungskette sind extreme Herausforderungen. War man bisher dazu gezwungen, auch diese betrieblich

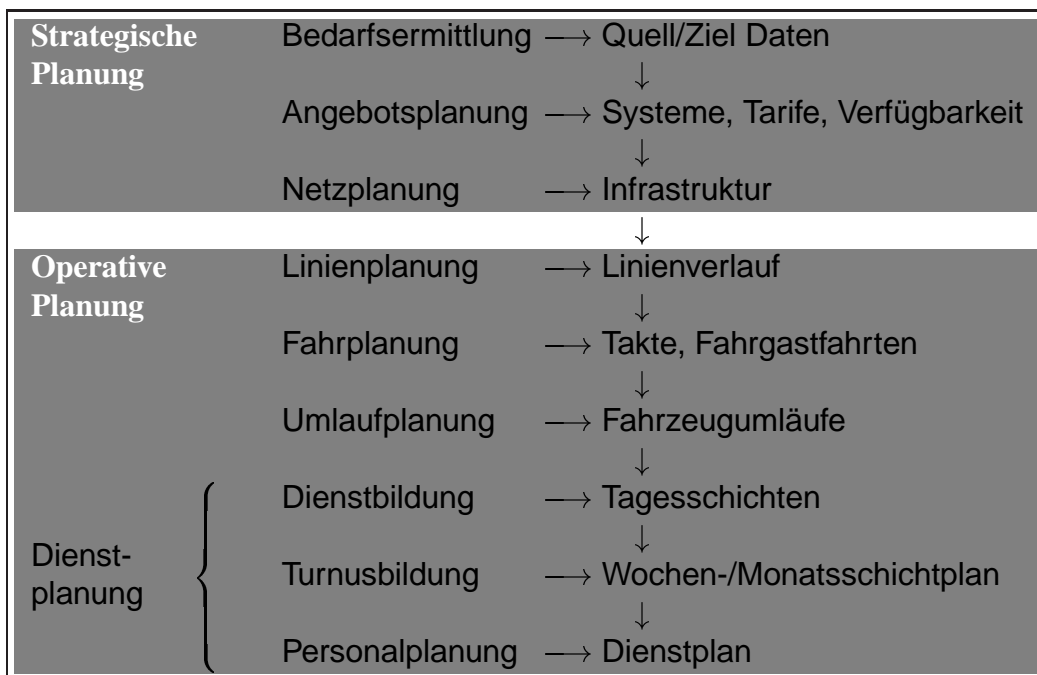


ABBILDUNG 2.35: Der Planungsprozeß im ÖPNV.

halbwegs abgeschlossenen Teilprobleme künstlich noch weiter zu untergliedern, so erlaubt der Entwicklungsstand in der Mathematik und der Rechnertechnologie heute erstmals eine einheitliche Behandlung mit der Möglichkeit der Ausnutzung sämtlicher planerischer Freiheitsgrade. Unser *Ziel* in diesem Schwerpunkt ist die Entwicklung von mathematischen Werkzeugen zur Verkehrsplanung. Als Endausbau schwebt uns dabei ein *Computer Aided Scheduling* (CAS) System vor, das der Verkehrsplaner benutzt wie ein Konstrukteur ein CAD System. Denn *„In grundsätzlich gleicher Art und Weise könnten auch im Verkehr alle Planungs-, Entwurfs-, Organisations- und Dispositionsprozesse verbessert und erheblich beschleunigt werden.“*, wie der Wissenschaftliche Beirat beim Bundesminister für Verkehr [1] bereits 1984 formulierte.

Gegenwärtig bearbeiten wir zwei *Projekte* im ÖPNV: Die Fahrzeugumlaufplanung und die Dienstplanung. Bei dem letztgenannten Projekt geht es um die Entwicklung eines Optimierungsmoduls zur Dienstbildung, dem wirtschaftlich wichtigsten Teilproblem der operativen Planung. Für die Umlaufplanung ist diese Aufgabe gelöst: Optimale Umlaufpläne für Unternehmen von der Größe der Hamburger (HHA und VHH) oder Berliner Verkehrsbetriebe (BVG), die zu den größten Nahverkehrsunternehmen der Welt zählen, können in wenigen Stunden auf einer handelsüblichen Workstation berechnet werden. Im Zuge des Transfers dieses Tools in die Softwareprodukte unserer mit marktführenden Kooperations-

partner HanseCom GmbH und IVU GmbH arbeiten wir deshalb an der Integration dieses Tools in die Gesamtplanung.

Fahrzeugumlaufplanung

Bearbeitet von: Andreas Löbel

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Bei der *Fahrzeugumlaufplanung* im ÖPNV müssen die Fahrgastfahrten eines bereits festgelegten Fahrplans zu Fahrzeugumläufen verkettet werden. Das Ziel ist dabei, mit einer Minimalanzahl an Fahrzeugen auszukommen. Zweitrangig wird auch eine Verminderung der operativen Kosten angestrebt. Die Umlaufplanungsprobleme unserer Kooperationspartner, der Verkehrsbetriebe von Berlin (BVG) und Hamburg (HHA und VHH), sind von enormer Größe: Bis zu 14 Betriebshöfe mit 10 verschiedenen Fahrzeugtypen bedienen mehr als 25.000 Fahrgastfahrten! Die planerischen Freiheitsgrade des Problems sind die verschiedenen Möglichkeiten, Fahrgastfahrten miteinander zu Umläufen verknüpfen. Von diesen Übergängen gibt es bis zu 70 Millionen Möglichkeiten, die alle zur Konstruktion von Umläufen und letztlich von ganzen Umlaufplänen verwendet werden können.

Trotz dieser Dimensionen können solche Probleme mit *mathematischen Optimierungstechniken* beweisbar optimal (oder beweisbar annähernd optimal) gelöst werden. Wir verwenden einen Ansatz der ganzzahligen Programmierung, der auf einem Multi-Commodity-Flow-Modell basiert. Neu ist, daß das Problem nicht zerstückelt oder der Lösungsraum eingeschränkt wird. Es werden vielmehr alle Freiheitsgrade zur Optimierung genutzt. Die Modelle führen auf ganzzahlige lineare Programme mit bis zu 70 Millionen Variablen, die wir mit neuartigen Lagrange-, LP- und Netzwerkflußtechniken bearbeiten.

Der *Transfer* der Algorithmen in die Softwareprodukte unserer Kooperationspartner HanseCom GmbH und IVU GmbH wird vorbereitet bzw. ist bereits erfolgt. Auch die Siemens AG hat Rechte an unserem Verfahren erworben. Wir arbeiten derzeit an der *Umsetzung* der Einsparpotentiale aus der Umlaufplanung in die Praxis. Dazu ist eine sorgfältige Kalibrierung des Tools nötig. Das Ziel ist, Umlaufpläne zu erzeugen, die direkt in den Fahrbetrieb gehen können. Außerdem muß der Umlaufplan für die nachfolgende Dienstplanung tauglich gemacht werden. Problemfelder sind etwa die Vermeidung von Line-Hopping und die "Pausentauglichkeit von Umläufen". Es zeichnet sich ab, daß diese Anforderungen machbar sind.

Optimierungsmethoden zur Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV werden in [4, 8] behandelt, ihre Anwendung bei der BVG in [10]. Die mathematischen Verfahren finden sich in der Dissertation [8], einzelne Aspekte werden diskutiert in [6, 9] (LP-Techniken), [5] (Lagrange-Verfahren) und [7] (Dantzig-Wolfe Dekomposition).

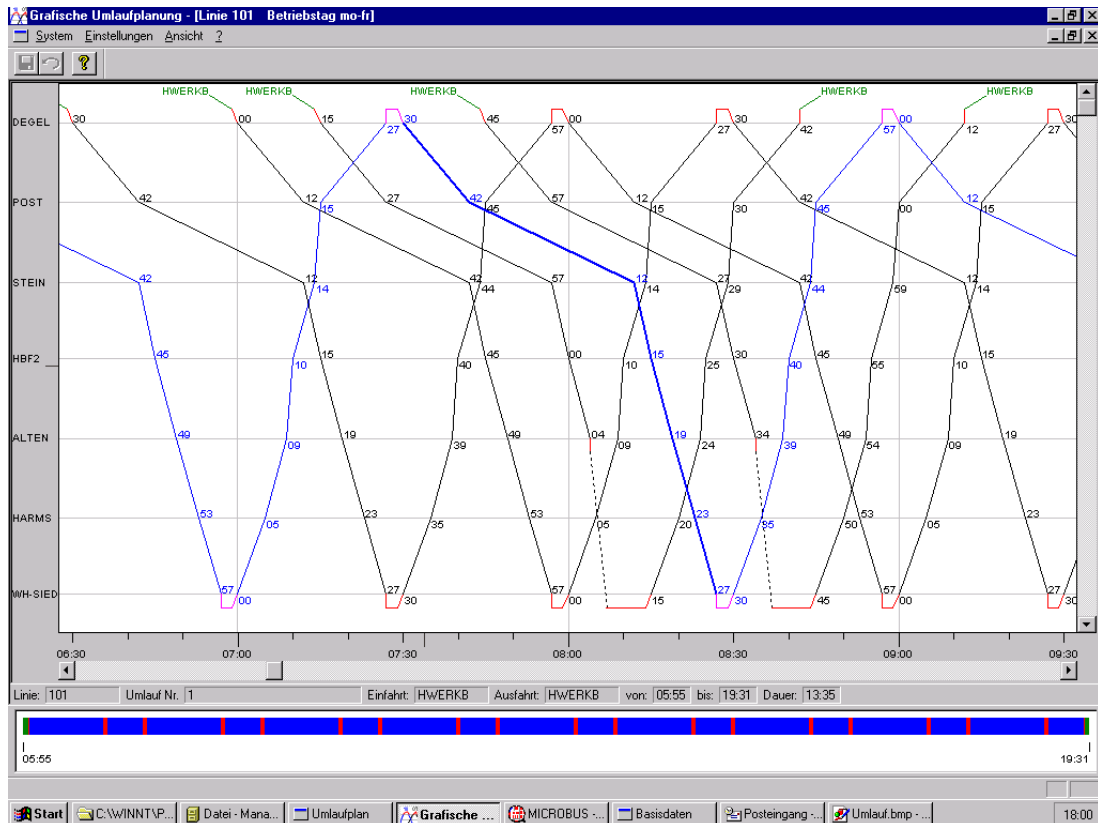


ABBILDUNG 2.36: Ausschnitt aus einem Umlaufplan.

Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Andreas Löbel

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Bei unserem Projekt zur *Dienstplanung* im ÖPNV geht es um die Optimierung der Dienstbildung. Es gilt, die sich aus den Fahrzeugumläufen ergebenden Aufgaben, die sog. Dienstelemente, durch Tagesdienste abzudecken. Der Personalbedarf soll dabei insgesamt möglichst gering sein. Die Verkehrsbetriebe sehen die Dienstbildung als den kostenrelevanten Schritt der Dienstplanung an, während die nachfolgende Turnus- und Personaleinsatzplanung mehr auf eine gerechte Verteilung der Arbeit und die Mitarbeiterzufriedenheit zielen. Bei den Problemen großer Verkehrsbetriebe wie der von Berlin (BVG) und Hamburg (HHA) sind für einen einzigen Betriebshof bis zu 10.000 Dienstelemente mit einer entsprechend gewaltigen Zahl an Kombinationsmöglichkeiten zu verplanen.

Eine besondere Schwierigkeit bei der Dienstbildung liegt in den vielen gesetz-

lichen, tariflichen und betrieblichen Regelungen, die genau beachtet werden müssen. Hier ist viel Sorgfalt in der *Modellierung* nötig, da die Planungsergebnisse sonst nicht akzeptiert werden. Unser Ansatz deckt alle uns bekannten Regelungen und Planungskriterien korrekt ab und umfaßt insbesondere die Dienstplanungsmodelle in den Softwareprodukten unserer Kooperationspartner, siehe [3].

Unser Projektziel ist nicht, die Probleme optimal zu lösen — die Komplexität des Regelwerkes und die Erfahrungen mit ähnlich großen Problemen in der Personaleinsatzplanung im Luftverkehr würden ein solches Ergebnis zu einer großen Überraschung machen. Aber wir wollen durch die Berücksichtigung aller planerischen Freiheitsgrade in vertretbarer Zeit deutlich bessere Ergebnisse erzielen, als dies mit den derzeit verwendeten Verfahren möglich ist.

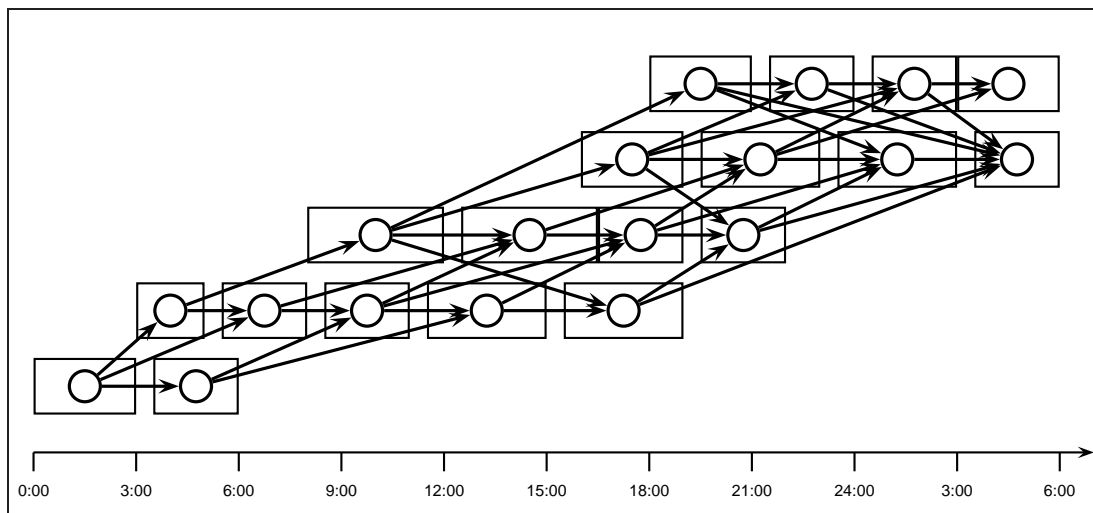


ABBILDUNG 2.37: Ein Dienstplanungsgraph. Entlang einer Zeitachse sind Dienstelemente als Rechtecke aufgetragen. Diese, abstrahiert zu den als Kreisen dargestellten Knoten, lassen sich auf verschiedene Weise zu Diensten verknüpfen.

Wir verwenden einen *Branch-and-Price Ansatz*. Dieser basiert auf einem Set-Partitioning- (bzw. Set-Covering-) Modell der ganzzahligen Optimierung, das wiederum von einer graphentheoretischen Darstellung des Problems abgeleitet ist, siehe Abbildung 2.37. Für den Pricing-Schritt entwickeln wir parametrisierte Dienstgeneratoren für verschiedene Dienstarten, die mit Methoden der dynamischen Programmierung und mit Heuristiken arbeiten. Die Master-LPs bearbeiten wir mit einer Reihe von Large-Scale-Techniken. Zur Berechnung von unteren Schranken verwenden wir kombinatorische Relaxierungen des Dienstplanungsproblems.

Wir stehen derzeit in der Entwicklung dieser Verfahren. Der *Transfer* unserer

Algorithmen in die Softwareprodukte unserer Partner ist Bestandteil unserer Kooperationsverträge.

Publikationen

- [1] Wissenschaftlicher Beirat beim Bundesminister für Verkehr — Gruppe Verkehrstechnik —, *Zur Bedeutung Interaktiver Planungs- und Organisationshilfen im Verkehrswesen*, Internationales Verkehrswesen **3** (1984), 167–174.
- [2] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Optimization of Transportation Systems*. In ACTA FORUM ENGELBERG 98, VDF Hochschulverlag an der ETH Zürich, Schweiz, 1998. Erhältlich als Preprint SC 98–09, ZIB, 1998.
- [3] R. Borndörfer, A. Löbel, U. Strubbe und M. Völker, *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*, ZIB Preprint SC 98–41, ZIB, 1998. Erscheint in Heureka '99: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln, 1999.
- [4] M. Grötschel, A. Löbel und M. Völker, *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im Öffentlichen Nahverkehr*. In K.H. Hoffmann, W. Jäger, T. Lohmann und H. Schunck (Hsg.), *Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, Springer Verlag, 1997. Erhältlich als Preprint SC 96–08, ZIB, 1998.
- [5] A. Kokott und A. Löbel, *Lagrangean Relaxations and Subgradient Methods for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Preprint SC 96–22, ZIB, 1996.
- [6] A. Löbel, *Solving Large-Scale Real-World Minimum-Cost Flow Problems by a Network Simplex Method*, Preprint SC 96–07, ZIB, 1996.
- [7] ———, *Experiments With a Dantzig-Wolfe-Decomposition for Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Preprint SC 97–16, ZIB, 1997.
- [8] ———, *Optimal Vehicle Scheduling in Public Transit*, Dissertation, TU Berlin, 1997. Erschienen im Shaker Verlag, Aachen, 1998.
- [9] ———, *Recent Computational Developments for Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Preprint SC 97–17, ZIB, 1997.
- [10] A. Löbel und U. Strubbe, *Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und Praktische Anwendung*. In Heureka '96: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln, 1996. Erhältlich als Preprint SC 95–38, ZIB, 1995.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Andreas Bley

- Erwin–Stephan–Preis der Technischen Universität Berlin 1998
- GOR Diplomarbeitspreis 1998

Folkmar A. Bornemann

- Ruf auf den Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen, TU München (Nachfolge R. Bulirsch).
– angenommen zum 01.04.1998

Sven Krumke

- Dissertations-Preis der Unterfränkischen Gedenkjahrstiftung für die Wissenschaft 1998 (Dissertations-Preis der Universität Würzburg)

Sebastian Reich

- Ruf als Lecturer an der Universität von Surrey, U.K.
– angenommen zum 01.09.1998

Robert Weismantel

- Ruf auf den Lehrstuhl für Mathematische Optimierung an der Otto–von–Guericke–Universität Magdeburg
– angenommen zum 13.05.1998

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)

ein Überblick zur ersten Orientierung gegeben. Daran anschließend folgen die ausführlichen Beschreibungen.

KOBV: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wird seit 1997 im Rahmen eines dreijährigen Projektes am ZIB aufgebaut. Technischer Kern des Verbundes ist die KOBV-Suchmaschine, die die Kataloge der wissenschaftlichen Bibliotheken in der Region über das Internet zu einem virtuellen Katalog vereint und auf diese Weise den Nutzern weltweit den Zugriff auf die Bibliotheksbestände in Berlin und Brandenburg ermöglicht. Mit der Realisierung des neuartigen technischen Konzeptes geht die Umsetzung eines neuen Organisationsmodelles einher. Anders als die zentralen Bibliotheksverbände der Bundesrepublik setzt der KOBV auf eine eher “lose”, dezentrale Verbundstruktur, in der die Bibliotheken in Eigeninitiative und Eigenverantwortung zusammenarbeiten. Eines der wesentlichen Ziele, das mit der Umstrukturierung der regionalen Informationsinfrastruktur im KOBV angestrebt wird, liegt in der weltweiten Öffnung der Bibliotheksregion, die aufgrund ihrer umfangreichen und wertvollen Bestände zu den wichtigsten in Deutschland zählt. Die Einführung eines dezentralen, flexiblen Verbundmodelles bietet gleichzeitig die Möglichkeit, diese Infrastruktur künftig rasch an die sich rapide ändernden Bedürfnisse der Nutzer anzupassen.

Math–Net: Ziel des Math–Net-Projektes ist der Aufbau von kostengünstigen und nutzergesteuerten elektronischen Informationsdiensten, die den Wissenschaftlern vom Arbeitsplatzrechner aus den effizienten Zugang zu aktueller, qualitativ hochwertiger Volltext-, Fakten-, Literaturhinweis-, Personen- und Software-Information im Bereich der Mathematik ermöglicht. Hierzu ist eine angemessene organisatorische und technische Infrastruktur aufgebaut worden, die darüber hinaus Modellcharakter sowohl für andere mathematische Institute und Fachbereiche als auch für andere Wissenschaftsgebiete besitzt. Die bisherige Form elektronischer Informationsversorgung und -bereitstellung in den Fachbereichen ist in flächendeckende Informations- und Kommunikationsdienste für die mathematische Wissenschaft eingebettet worden. Am Math–Net–Projekt sind fast alle

mathematischen Fachbereiche in Deutschland unter der Leitung des ZIB beteiligt.

Museumsprojekt: 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 auch inhaltlich mitgewirkt wurde.

InfoVis: Ziel dieses Schwerpunkts war der Aufbau eines WWW-basierten Fachinformationssystems für das Gebiet 'Scientific Visualization'. Das System wurde im Berichtsjahr als netzweiter Dienst zur Verfügung gestellt. Er bietet – unter einer einheitlichen Nutzeroberfläche – eine elektronische Bibliothek, ein bildbasiertes Retrieval-System und einen Informationsdienst für Tagungsankündigungen. Seit Abschluß des zweijährigen Projekts im Oktober 1998 wird die Aktualisierung der vom System angebotenen Informationen mit hauseigenen Mitteln weitergeführt.

Odelab: 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 Fertigstellung der neuesten Version der Computeralgebrasystems REDUCE sowie in der Vervollständigung der Integration des Internet (insbesondere des World Wide Webs und neuerer Standards und Techniken des Webs) in die Produkte. Die nächste Version 3.7 von REDUCE wird voraussichtlich im zweiten Quartal 1999 von Tony Hearn freigegeben. Diese Version wird ein erheblich erweitertes Leistungsspektrum haben. Durch die Verwendung der Dienste des WWW können die neuesten Forschungsergebnisse und Codes sofort weltweit zur Verfügung gestellt werden. Auf einigen Serversystemen werden Implementierungen dieser Algorithmen als Subsystem bereitgestellt und sind dann für Interessenten einfach verwendbar. Für die Produkte im Bereich Computeralgebra bietet das WWW darüberhinaus die Möglichkeit einer Präsentation sowie einer automatischen Verteilung neuer oder korrigierter Module.

ICM'98: Für den im August 1998 veranstalteten Weltkongress der Mathematik, den *International Congress for Mathematicians 1998*, wurden internet-basierte Werkzeuge zur Durchführung und zur Organisation entwickelt und bereitgestellt. Der mit mehr als 3500 Teilnehmern große Kongress konnte so in vielen Managementaufgaben effiziente und schnelle elektronische Unterstützung bieten. Über einen umfangreichen WWW-Konferenzserver konnten darüberhinaus alle wichtigen Ereignisse eingesehen und alle relevanten Informationen abgerufen werden.

3.2 **Schwerpunkte**

3.2.1 **Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)**

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch, Wolfram Schneider, Josef Willenborg

Kooperationspartner: Universitätsbibliotheken der Freien Universität Berlin, der Humboldt-Universität zu Berlin und der Technischen Universität Berlin, Bibliothek der Hochschule der Künste Berlin, Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Universitätsbibliotheken der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus, der Europa-Universität Viadrina Frankfurt (Oder) und der Universität Potsdam, Stadt- und Landesbibliothek Potsdam, Bibliotheken der sechs Fachhochschulen im Land Brandenburg

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin; Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg

Mit dem zukunftsweisenden KOBV-Projekt haben die Bibliotheken in der Region unter der Leitung von M. Grötschel (ZIB) Neuland betreten, nicht nur in technischer, sondern auch in organisatorischer Hinsicht. Lag der Fokus der konzeptionellen Arbeiten im vergangenen Jahr auf dem technischen Verbundmodell, so stellte zu Beginn des Jahres 1998 eine spartenübergreifende Arbeitsgruppe leitender Bibliothekare aus Berlin und Brandenburg gemeinsam mit dem ZIB Überlegungen zur inhaltlichen Konzeption des KOBV an und erarbeitete erste Leitlinien für die Zusammenarbeit der Bibliotheken im "verteilten Bibliotheksverbund" [1]. In einem weiteren Papier formulierte die Arbeitsgruppe die "Mission" des KOBV, die auf dem KOBV-Server veröffentlicht ist¹. Damit haben die allgemeinen theoretischen Vorüberlegungen zur technischen und inhaltlichen Konzeption des KOBV im ersten Quartal 1998 einen ersten Abschluß gefunden.

Das wichtigste "politische" Ereignis in der ersten Jahreshälfte 1998 war am 11. Mai 1998 die Unterzeichnung einer Vereinbarung zwischen den Ländern Berlin und Brandenburg und dem ZIB über die Durchführung des KOBV-Projektes [2]. Mit der Vereinbarung wurde das KOBV-Projekt auf eine rechtliche Grundlage

¹<http://www.kobv.de/obj/index.html>

gestellt. Da gleichzeitig in einer gesonderten Vereinbarung die finanzielle Beteiligung des Landes Brandenburg geregelt wurde, sind nunmehr beide Länder offiziell an der Durchführung und an der Finanzierung des KOBV-Projektes beteiligt.

Insgesamt war das erste Halbjahr 1998 geprägt durch die Auswertung einer europaweiten Ausschreibung eines lokalen integrierten Bibliothekssystems und einer Suchmaschine, die die Kanzler der vier Berliner Hochschulen im August 1997 initiiert hatten. Das ZIB war zwar an der Ausschreibung nicht beteiligt, hat die Bibliotheken jedoch in technischen Fragen beraten und ihnen seine Räumlichkeiten sowie seine technische Ausstattung für die Teststellungen der beteiligten Firmen zur Verfügung gestellt. Die Vertragsverhandlungen wurden auf Wunsch der Bibliotheken unter Federführung des ZIB geführt. Am 07. Juli 1998 unterzeichneten die vier an der Ausschreibung beteiligten Hochschulen und das ZIB einen Konsortialvertrag mit der Firma Ex Libris Deutschland GmbH. Vertraglich ist darin unter anderem festgelegt, daß die KOBV-Suchmaschine auf der Basis des Bibliothekssystems ALEPH500 von der KOBV-Projektgruppe gemeinsam mit der Firma Ex Libris entwickelt wird.

Das dritte Quartal 1998 war gekennzeichnet durch die Beschaffung und Implementierung des Produktionsservers, durch die Installation von ALEPH500 und durch umfassende Schulungen der KOBV-Projektgruppe in ALEPH500 (Systemadministrator-, Systembibliothekar-, Anwenderschulungen) und ORACLE. Erst im September 1998 - nach einer aufgrund der Ausschreibung eingetretenen einjährigen Verzögerung - konnte die KOBV-Projektgruppe auf der von den Kanzlern der vier o.g. Hochschulen geschaffenen gemeinsamen Grundlage mit den konkreten Arbeiten zur Realisierung der KOBV-Suchmaschine beginnen. Gemeinsam mit Ex Libris entwickelte sie ein Match- und Merge-Verfahren und begann mit den technischen Arbeiten zum Aufbau des Fremd- und Normdatenservers. Der vertraglich mit der Firma vereinbarte Terminplan sah vor, daß zum Jahresende 1998 die Betaversion der Suchmaschine in Betrieb gehen sollte. Dieses ehrgeizige Ziel konnte nicht erreicht werden; der Termin wird sich in den Februar 1999 verschieben.

Mitte 1998 hat die KOBV-Projektgruppe die Zusammenarbeit mit den Bibliotheksverbänden und der Deutschen Bibliothek aufgenommen und den technischen Zugang über die Schnittstelle Z39.50 getestet. Im Rahmen einer Diplomarbeit, die von einem Mitarbeiter der KOBV-Projektgruppe betreut wird, wurde über ein CGI-Script der Zugang zum Z-Server der Deutschen Bibliothek realisiert. Dieses Verfahren wurde von der KOBV-Projektgruppe insbesondere als Übergangslösung zur Fremddatennutzung für die Brandenburger Bibliotheken konzipiert, die seit Beginn des Jahres 1998 nicht mehr am regionalen Bibliotheksverbund BVBB beteiligt waren.

Aufgrund dieser Zusammenarbeit mit den Verbänden und der Beteiligung an den überregionalen Gremien hat der KOBV mit seiner neuartigen Verbundkon-

zeption inzwischen in der bibliothekarischen Öffentlichkeit einen recht hohen Bekanntheitsgrad erreicht. Im Mai war der KOBV zum ersten Mal auf dem Bibliothekartag in Frankfurt/Main am Stand der AG der Verbundsysteme vertreten. Während des Sommers fanden im ZIB mehrere Gruppenveranstaltungen statt, in denen das Verbundkonzept vorgestellt und diskutiert wurde. Dem großen Interesse der Fachöffentlichkeit am KOBV hat die Projektgruppe insofern Rechnung getragen, daß die WWW-Seiten des KOBV völlig überarbeitet, neu strukturiert und mit der Inbetriebnahme des neuen KOBV-Servers unter einer neuen WWW-Adresse² ins Netz gestellt wurden.

Publikationen

- [1] M. Kuberek (Redaktion) *Bibliothekarische Inhalte und Zielsetzungen des KOBV*, Technical Report TR 98-03, ZIB, 1998.
- [2] *Vereinbarung zur Durchführung des Projektes Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*³.

3.2.2 Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, 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

Internetspezifische Informationsdienste gewinnen zunehmend an Bedeutung. Ohne sie sind mit vertretbarem Aufwand die großen Mengen verfügbarer elektronischer Information nicht mehr sinnvoll zu bewältigen. Auch die Mathematik ist dazu übergegangen, ihr Informationsangebot selbstorganisiert im Netz bereitzustellen um auf diese Weise vielfältig voneinander zu profitieren. Die Möglichkeiten des gegenseitigen "Nehmens und Gebens" spannen einen weiten Bogen und erstrecken sich von der Vorabveröffentlichung von Artikeln, Manuskripten und Büchern, über persönliche Daten (personal homepages) inclusive der Vita bis hin zu aktuellen Forschungsergebnissen und Projektbeschreibungen. Das Problem aller Informationsbereitsteller im Internet ist es heute, Informationen so bereitzuhalten, daß ein

²<http://www.kobv.de>

³<http://www.kobv.de/docs/index.html>

Benutzer mit vertretbarem Aufwand relevante aktuelle Informationen findet, dabei aber nicht von Unmengen von Treffern überfordert und trotzdem der Aufwand zur Pflege des Informationsangebots minimiert wird. Die im Math-Net-Projekt vertretenen mathematischen Fachbereiche in Deutschland haben unter der Projektleitung von M. Grötschel begonnen, in dem noch bis Ende März 1999 laufenden Projekt *Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)*, die Internetressourcen ihres Fachgebietes in Deutschland aufzubereiten und so eine wichtige Infrastruktur für die Mathematik aufgebaut [1], [2].

Ein Grundgedanke des Math-Net ist, neben der technischen auch eine personelle Infrastruktur aufzubauen, die Verantwortlichkeit und Zuständigkeit beim Bereitstellen des elektronischen Informationsangebots sichern hilft. Es sind die Fachbereiche, die mit ihrem Namen für das auf ihren Servern bereitgestellte Angebot geradestehen. Sie haben ein originäres Eigeninteresse, daß ihre Server einen hilfreichen, gutstrukturierten und möglichst alle wichtigen Bereiche abdeckenden Service bieten. So wie es Bibliotheksbeauftragte gibt, wird es zukünftig auch WWW-Beauftragte geben, die sowohl für die Kontinuität wie für die Qualität des Angebots verantwortlich zeichnen. Heute gibt es an fast allen mathematischen Instituten und Fachbereichen Math-Net-Ansprechpartner, die ihre Aktivitäten untereinander koordinieren. Darüber hinaus sind auch übergeordnete Organisationen, wie die Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), die Konferenz der Mathematischen Fachbereiche (KMathF) und das Zentralblatt für Mathematik in die Aktivitäten eingebunden. Zur Zeit bestehen weitere Kontakte zu anderen europäischen und amerikanischen Organisationen.

Neben dem Aufbau dieser personellen Infrastruktur ist vor allem die inhaltliche Strukturierung in Form einer standardisierten WWW-Seite, der sogenannten Math-Net-Seite, bei den teilnehmenden Einrichtungen erreicht worden. Durch Einführung von wenigen, überschaubaren und prägnanten Kategorien und Unterkategorien sollten die relevanten Informationen aufgeteilt und zusammengefaßt werden. Außerdem sollten wichtige Verweise und die Möglichkeit einer Volltextsuche bei den teilnehmenden Einrichtungen eingerichtet werden. Das Ergebnis spiegelt sich in einer genormten WWW-Seite wieder, die die Funktion einer *Secondary Homepage* besitzt.

Frühzeitig ist von seiten des Math-Net-Projekts auch die Verwendung und Bereitstellung von Metadaten angestrebt worden, um eine feingranulierte Suche zu unterstützen. Dabei bekommt zusehens die Dublin-Core Initiative große Beachtung, die spezielle Metadaten sets für elektronische Dokumente entwickelt hat. Das Dublin-Core (DC) Metadaten set zeichnet sich durch die Konzentration auf die 15 wichtigsten Elemente wie Titel, Autor, Stichwörter, etc. aus. Das Math-Net-Projekt war dabei einer der ersten Pilotanwender, die diese Initiative aufgegriffen und unterstützt haben.

Besonders sinnvoll erscheint die Verwendung der DC-Metadaten in Zusammen-

hang mit Suchmaschinen. In Math-Net Projekt wird dafür das Harvestsystem eingesetzt, das darüber hinaus den architektonischen Vorteil besitzt, das die an den Institutionen anfallenden Daten einerseits zur lokalen Suche, andererseits aber auch in zentralen (hierarchisch organisierten) Servern zur globalen Suche benutzt werden können. Das Zusammenspiel von Harvest und den vorhandenen Metadaten geht soweit, daß wir, neben einer globalen Suche, darauf aufbauend auch Spezialdienste anbieten⁴. So gibt schon seit längerem ein absuchbares Preprintarchiv, ein Softwarearchiv sowie seit Ende 1998 einen Nachweisdienst für *Personal Homepages*.

Publikationen

- [1] M. Grötschel, W. Dalitz, V. Winczewski *Math-Net: Ein Informationssystem der Mathematik*, Preprint SC 98–25, ZIB, 1998
- [2] M. Grötschel, W. Dalitz, V. Winczewski *Math-Net: Ein Informationssystem der Mathematik*, DFN Mitteilungen, Heft 48, November 1998

3.2.3 Informationsserver des ICM'98

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Stefan Hartmann, Christoph Helmberg, Michael Walter

Kooperationspartner: Executive Committee der International Mathematical Union (IMU), Organisationskomitee des International Congress of Mathematicians Berlin 1998 (ICM'98)

Der vom 18.–27. August in Berlin veranstaltete *International Congress of Mathematicians* (ICM'98) wurde mit erheblichem informationstechnischem Aufwand unterstützt und begleitet⁵. Zum ersten Male in der Geschichte dieser Konferenz, die mit der Fieldsmedaillenverleihung einen ähnlichen Stellenwert wie eine "Nobelpreisverleihung in der Mathematik" besitzt, wurden wichtige Organisationsabläufe weitestgehend elektronisch realisiert. Im einzelnen betraf das die Punkte

- Präregistrierung⁶: Hier konnten sich alle Interessierten schon im Vorfeld der Konferenz unverbindlich anmelden. Mit Hilfe dieser Anmeldungen konnte ein umfangreicher Benachrichtigungsdienst aufgebaut werden.
- Benachrichtigungsservices⁷: Dieser elektronische Benachrichtigungsdienst hatte die wichtige Funktion, alle am ICM'98 Interessierten auf dem Laufenden zu halten. Wichtige Deadlines, Termine und allgemeinere Informationen konnten so rechtzeitig und schnell übermittelt werden. Auch wurde damit

⁴<http://www.math-net.de/>

⁵<http://elib.zib.de/ICM98/>

⁶<http://elib.zib.de/icm98/PreRegister.html>

⁷<http://elib.zib.de/ICM98/CL/>

die Konferenz immer im allgemeinen Bewußtsein gehalten. Die hier gewonnenen Daten dienten auch den "Requests for the Second Announcement"⁸.

- Anmeldung und Buchungsservice⁹: Die verbindliche Registrierung zum Kongreß konnte sowohl vollständig über das Internet, wie auch, wegen der Übermittlung sensibler Daten, auf herkömmlichem Wege erfolgen. Über 50% der Teilnehmer entschieden sich für die elektronische Anmeldung. Gleichzeitig konnte ein umfangreiches Rahmenprogramm mitgebucht werden. Die öffentlichen (nichtsensiblen) Teilnehmerdaten waren dann auf dem Konferenzserver zugänglich, so daß der Fortgang der Teilnehmerbeteiligung, auch nach Ländern gruppiert, genau verfolgt werden konnte.
- Scheduling der eingereichten Vorträge¹⁰: Alle Teilnehmer konnten Vorträge einreichen, die einem Begutachtergremium zur Bewertung und zur Auswahl zur Verfügung standen. Die angenommenen (insgesamt über 1500) Vorträge mußten dann in den 19 wissenschaftlichen Kategorien so verteilt werden, daß keine Konflikte mit anderen wichtigen Konferenzereignissen oder Überschneidungen stattfanden.
- Scheduling von Adhoc-Vorträgen¹¹: Für über 250 Vortragende gab es die Möglichkeit, noch während der Konferenz einen Vortrag anzumelden und zu halten.
- Raumplanung: Hier wurden den Programmverantwortlichen umfangreiche Hilfsmittel für die konfliktfreie Raumvergabe vor Ort bereitgestellt. Dies betraf auch die Adhoc-Vorträge.
- online Programm¹²: Aufgrund der bei einer Konferenz dieser Größenordnung notwendigerweise auftretenden Änderungen im Programmablauf war das verbindliche und aktuelle Programm das, welches auf dem Server dynamisch bereitgestellt wurde.
- Druckservices: Die Teilnehmerdaten¹³ dienten als Basis für die Erstellung der erforderlichen Namensschilder, Adreßetiketten, etc.

Für jeden einzelnen der genannten Punkte sind z. T. umfangreiche Programmpakete entwickelt worden.

Da an der Durchführung dieser Veranstaltung, die mit über 3500 Teilnehmern zu den größten ihrer Art zählt, viele Institutionen beteiligt waren, war der Koordinierungsaufwand entsprechend hoch. Programmtechnische Schnittstellen gab es zu mehreren der beteiligten Institutionen.

⁸<http://elib.zib.de/icm98/RegPers.html>

⁹<http://elib.zib.de/cgi98/register>

¹⁰<http://elib.zib.de:88/cm98-test/v1.html>

¹¹<http://elib.zib.de:88/cm98/>

¹²<http://elib.zib.de/icm98/program.html>

¹³<http://elib.zib.de/icm98>

Darüber hinaus wurde der ICM'98 Konferenzserver das ganze Jahr über auf dem neuesten Stand gehalten.

3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: Carlos Saro, Beate Schröder, Christian Zimmer, Ekaterina Atanassova (ab September 1998)

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

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

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 Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Weitere Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum (seit 1991), dem Bayerischen Nationalmuseum (seit 1995), dem Deutschen Hygienemuseum (seit 1997) und dem Museum im Wasserwerk (seit 1998). 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.

Auch im Jahre 1998 standen die unterschiedlichen Anwendungsprojekte im Vordergrund. Daneben wurde das Datenbankprogramm GOS in zahlreichen Details weiterentwickelt. Die Verbesserungen betreffen hauptsächlich eine bessere Kontrolle der eingegebenen Daten sowie eine einfachere Überarbeitung vorhandener

Daten.

Am Deutschen Hygienemuseum Dresden und am Deutschen Historischen Museum Berlin wurden im Berichtszeitraum Intranet–Applikationen entwickelt, welche einen deutlich vereinfachten Zugang zu den vorhandenen Daten auch durch Laien ermöglichen.

Die bereits im Sommer 1996 eingerichtete Internet–Datenbank des Deutschen Historischen Museums (<http://www.dhm.de/datenbank>) wurde ebenfalls quantitativ und qualitativ ausgebaut. Sie bildet weiterhin das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland.

Das im Vorjahr begonnene Projekt Musonet wurde Ende 1998 abgeschlossen. Dieses von der EU geförderte Projekt wurde in Zusammenarbeit mit dem Ungarischen Nationalmuseum (<http://www.hnm.hu>), der Archeocomp Association (<http://www.ace.hu>) und der Joanneum Research Graz (<http://www.joanneum.ac.at>) durchgeführt. Vom ZIB wurde das Datenformat des DHM an die von der CIMI (Consortium for the Computer Interchange of Museum Information, <http://www.cimi.org>) entwickelte Z39.50 Schnittstelle angepaßt. Die entwickelte Software wurde am DHM installiert und ist dort als Prototyp unter <http://www.dhm.de/musonet/dir.CGI> zugänglich.

3.2.5 WWW-Labors für numerische Software

Bearbeitet von: Hendrik Jurkschat, Ulrich Nowak, Uwe Pöhle, Lutz Weimann

Die Arbeiten zur Erstellung virtueller Labore für numerische Software wurden intensiv fortgeführt. Im Berichtszeitraum konnte die erste Version eines Labors für numerische Differentialgleichungslöser (ODELab) bereitgestellt werden¹⁴. Unter einer einheitlichen Benutzerschnittstelle erlaubt das Labor die Erprobung praktisch aller derzeit gängigen DG-Löser. Neben einer Vielzahl von bekannten und neuen Testproblemen können auch vom Benutzer selbst eingebene Probleme integriert werden. Dabei ist es möglich, den “wahren” Fehler einer numerischen Lösung zu messen und darzustellen.

Neben diesem Lösungsmodul bietet das Labor noch ein Reihe weiterer Module an, etwa zur Problemanalyse, zum Effizienzvergleich von Verfahren und zur Untersuchung des algorithmischen Verhaltens spezieller Verfahren. In Abbildung 3.1 ist das Aussehen der Bedieneroberfläche nach einer derartigen Integration dargestellt.

Vorwiegend für Ausbildungszwecke stehen auch eine Vielzahl von bekannten Standard-Diskretisierungen (Euler-Verfahren, klassische Runge-Kutta-Verfahren, BDF2 usw.) zur Integration mit konstanter Schrittweite zur Verfügung. beeinflussen kann.

Zur Zeit wird das Labor im Rahmen der Vorlesung “Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen” intensiv genutzt. Die gemachten Erfahrungen werden in die Weiterentwicklung eingehen.

3.2.6 Fachinformationsdienst Visualisierung

Fachinformationsdienst Visualisierung

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

Förderung: DFN-Verein/BMBF

Ziel des über einen Zeitraum von zwei Jahren geförderten Projekts war der Aufbau eines Fachinformationsdienstes für den Bereich Wissenschaftliche Visualisierung [2]. Der Dienst sollte verschiedene Teildienste unter einer einheitlichen Oberfläche für das World Wide Web zur Verfügung stellen. Zum Ende des Projekts (Oktober 1998) standen drei Teildienste bereit: eine digitale Bibliothek, ein bildbasierter Suchdienst für diese Bibliothek und ein Informationsdienst für Tagungsankündigungen.

Die durch eigene Software-Entwicklungen realisierten Teildienste digitale Bibliothek, bildbasiertes Retrieval und Tagungsankalender werden im folgenden kurz

¹⁴<http://newton.zib.de:8001/public/odelab/>

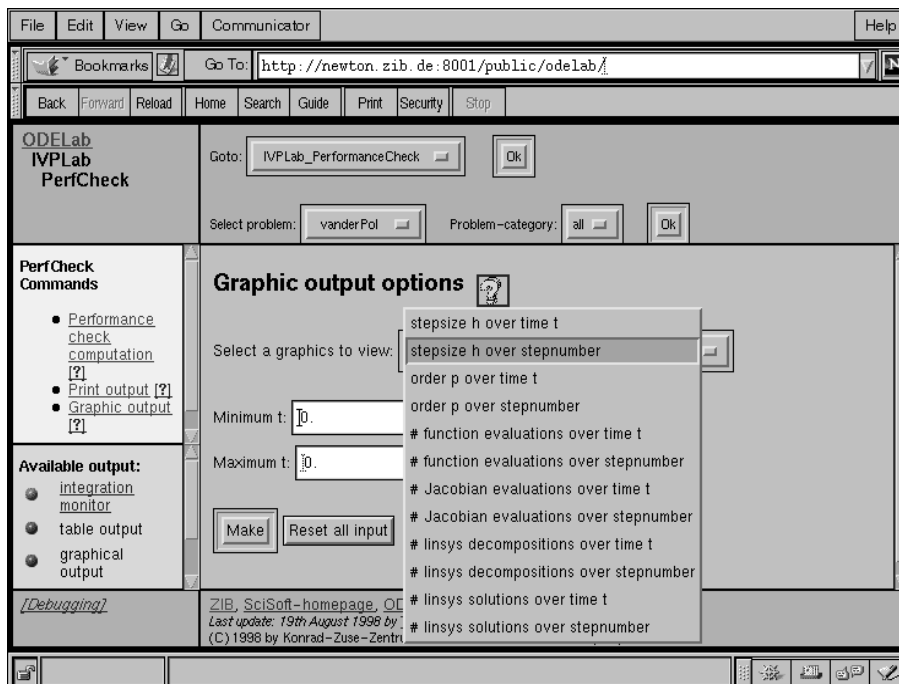


ABBILDUNG 3.1: Graphische WWW-Oberfläche von ODELab

skizziert.

ELECTRONIC VISUALIZATION LIBRARY¹⁵ (EVLIB). Der Aufbau einer vollautomatischen digitalen Fachbibliothek für die Wissenschaftliche Visualisierung bildete den Schwerpunkt des Projekts [3]. Im Jahr 1998 wurde die EVlib einem gründlichen Redesign unterzogen. Der Bestand der EVlib umfaßte am Jahresende ca. 1100 Dokumente. Zu einem Großteil stehen auch die Volltexte zu Verfügung. Autoren und eingetragene Nutzer können selbst Publikationen dem Bestand hinzufügen. Die Einträge werden in BibTeX-Bibliographien zusammengefaßt und stehen somit anderen Suchdiensten, etwa der Collection of Computer Science Bibliographies¹⁶, zur Verfügung.

IMAGE RETRIEVAL SERVICE¹⁷. Die Suchmöglichkeiten der EVlib wurden über die konventionellen Verfahren hinaus mit einer bildbasierte Recherchemöglichkeit versehen. Nutzer können so Literatur-Dokumente der EVlib anhand von Bildern suchen [1]. Motiviert wurde der Aufbau eines bildbasierten Dokumentenretrieval durch die hohe Anzahl von Abbildungen in der Literatur zur Wissenschaftlichen Visualisierung und auch den hohen Stellenwert, den Bilder generell bei menschlichen Kommunikationsprozessen einnehmen.

¹⁵<http://visinfo.zib.de/Library/>

¹⁶<http://iinwww.ira.uka.de/bibliography>

¹⁷<http://visinfo.zib.de/IRS/>

Nutzer des Dienstes können durch den Bestand an Bildern, die aus Dokumenten der EVlib extrahiert wurden, „browsen“ und anhand von ausgewählten Vorbildern andere Bilder – und damit auch die dazugehörigen Dokumente – suchen (vgl. Abbildung 3.2). In einem Nutzertest zeigte sich, daß diese neue Form des Zugangs zu Literatur sehr wertvoll und wesentlich „sinnlicher“ als die klassische textbasierte Suche sein kann.

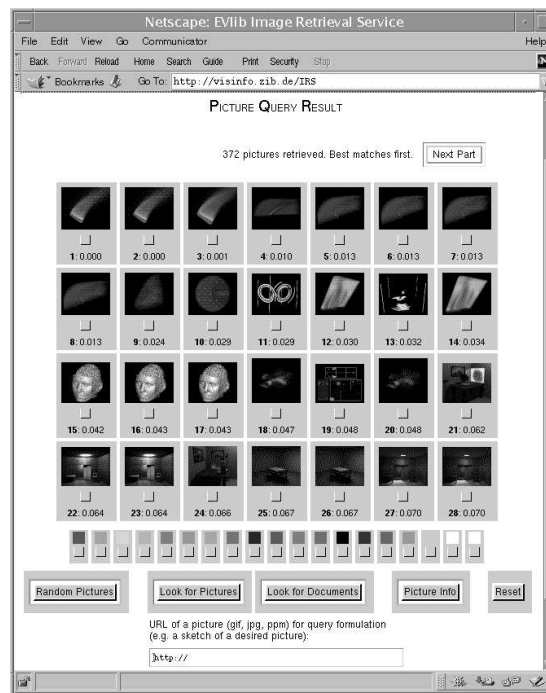


ABBILDUNG 3.2: Ergebnis einer Bildersuche mit dem „Image Retrieval Service“.

KONFERENZ-KALENDER¹⁸. Ein weiteres Teilprojekt umfaßte den Aufbau eines Informationsdienstes mit Hinweisen auf aktuelle Konferenzen, Workshops und Call-for-Papers. Der Dienst bietet eine Übersicht in Form eines Kalenders, in dem aktuelle Ereignisse verzeichnet sind. Weitere Ereignisse können von Nutzern selbst hinzugefügt werden.

Publikationen

- [1] Ingmar Decker, *A Picture-based Document Retrieval Service for the Electronic Visualization Library*, Technical Report TR 98-07, ZIB, 1998.
- [2] Ingmar Decker, Peter Müller, and Daniel Limbach, *VisInfo – Fachinformationsdienst Visualisierung*, DFN Mitteilungen (1998), no. 46, 6–7.

¹⁸<http://visinfo.zib.de/WAEVE/>

- [3] Peter Müller and Ingmar Decker, *The Electronic Visualization Library*, Technical Report TR 97-09, ZIB, 1997.

3.2.7 REDUCE

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Herbert Melenk, Walter Tietze

Kooperationspartner: Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA), Wolfram Koepf (HWTK Leipzig), 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), Francis Wright (Queen Mary College, London) Beiträge von zahlreichen Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien, und vielen europäischen Ländern.

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt von REDUCE liegt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen befindet sich am ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über das Web abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweitem Update). Die Umstellung des Systems zu einem weltweit verteilten Computeralgebrasystem wurde im Berichtszeitraum im wesentlichen fertiggestellt und von den REDUCE Entwicklern erprobt. Das Resultat dieser Arbeiten, die Version 3.7, wird in der ersten Hälfte des Jahre 1999 freigegeben. Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk erfreulicherweise wieder in die Arbeitsgruppe integriert werden. Dadurch konnten im Bereich der Algorithmen zur symbolischen Lösung von Gleichungssystemen wesentliche Weiterentwicklungen der letzten Jahre implementiert werden.

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 bzw. Nachfolgeprodukten 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 **Open-Math** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und platt-

formübergreifende 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 sowie bei der Tagung CASC 98 in St. Petersburg, Rußland, präsentiert.

Für den neuen Webstandard **MathML** zur Darstellung mathematischer Formeln im Internet wurde ein Kompatibilitätsmodul erstellt, das Ein- und Ausgaben in MathML Syntax erlaubt.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 66.000,- 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 \$ 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 Computer Science

Mit der Berufung von Alexander Reinefeld auf eine Professur für Praktische Informatik an der Humboldt-Universität zu Berlin (HU) konnte im Oktober 1998 die Bereichsleitung *Computer Science* nach längerer Vakanz wieder besetzt werden. Die Besetzung dieser wichtigen Position ist mit der Namensänderung des bisherigen Bereiches *Rechenzentrum* in *Computer Science (CS)* verbunden. Sie bringt den Anspruch zum Ausdruck, daß der bekanntermaßen hervorragende Service des ZIB auf dem Gebiet des Supercomputing, der Netzwerke sowie der allgemeinen informationstechnischen Infrastruktur nun auch um eigene Forschungsschwerpunkte der Praktischen Informatik ergänzt wird. Die mit der Bereichsleitung verbundene Professur der Praktischen Informatik, die auf der Grundlage einer Kooperationsvereinbarung zwischen der Humboldt-Universität zu Berlin und dem ZIB geschaffen wurde, bietet hierfür ideale Voraussetzungen.

Von 1992 bis 1998 war Herr Reinefeld als geschäftsführender Leiter des Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) tätig, das er in diesen Jahren maßgeblich als eines der deutschen Kompetenzzentren für paralleles und verteiltes Rechnen mit aufgebaut hat. Das PC² ist ein wissenschaftliches Institut der Universität GH-Paderborn. Auf überregionaler Ebene ist es insbesondere durch seine Forschungs- und Entwicklungsarbeiten mit *massiv parallelen* Transputersystemen (mit mehr als eintausend Prozessoren) bekannt, sowie in letzter Zeit durch den Einsatz von Standard-PC-Clustern als dedizierte Hochleistungsrechner. Mehrere Forschungsprojekte im kooperativen Betrieb von Hochleistungsrechnern im WAN-Verbund runden das Forschungsspektrum des PC² ab. Alle genannten Gebiete sind auch für das ZIB von besonderer Zukunftsrelevanz.

Die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des Bereiches Computer Science sind in der Regel eng mit den Serviceaufgaben verzahnt. 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, das Metacomputing, die wissenschaftliche Visualisierung, die Algorithmen zur Behandlung komplexer mathematischer Modelle, die Modellierung, die Programmierung und Programmoptimierung für Hochleistungsrechner und der Betrieb von (verteilten) Hochleistungssystemen. 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 Bereiches Computer Science an den HPSC-Aktivitäten des ZIB berichtet.

Die Leistung des Berliner Landeshochleistungsrechnersystems konnte mit Ausbau des massiv-parallelen Rechners Cray T3E im Herbst trotz Außerbetriebnahme des Rechners Cray T3D verbessert werden. In den folgenden Abschnitten wird näher darauf eingegangen.

Der Bereich Computer Science besteht aus vier Organisationseinheiten:

- Computer Science Research
- Höchstleistungsrechner
- Interne Rechenzentrumsdienste
- Anlagenbetrieb

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

4.1 Computer Science Research

Diese neu geschaffene Forschungsgruppe innerhalb des Computer Science-Bereiches wird sich mit den vielfältigen Aspekten der Architektur und Nutzung paralleler und verteilter Systeme befassen. Dabei gilt das Hauptaugenmerk der Schnittstelle zwischen Rechnerhardware (Prozessoren, Speicher, Verbindungsnetze) und der darauf ablaufenden Systemsoftware (Betriebssystem, Kommunikationssoftware, Mapping- und Lastverteilungsalgorithmen).

Ein geplanter Arbeitsschwerpunkt liegt im *Management verteilter System-Ressourcen*. Ziel der Forschungsarbeiten ist es, in einem überregionalen Lastverbund die vorhandenen Ressourcen besser zu nutzen, bzw. für ausgewählte Anwendungen durch Kopplung von Höchstleistungsrechnern eine insgesamt höhere Rechenleistung bereitzustellen. Die Dynamik der beteiligten Komponenten (Rechner, Netzwerke, Peripherie) wirft eine Vielzahl von Forschungsaspekten auf. Wir konzentrieren uns zunächst auf die Lösung von Fragen des kooperativen Management verteilter Ressourcen, der zugrundeliegenden Netzwerkprotokolle, der Kopplung paralleler Programmiermodelle sowie der effizienten Abbildung (Mapping) paralleler Anwendungen auf die zugrundeliegende verteilte Systemumgebung. Zu allen genannten Bereichen existieren umfangreiche Vorarbeiten, die nun im ZIB erweitert und ergänzt werden sollen.

Ein zweiter Arbeitsschwerpunkt der Forschungsgruppe *Computer Science Research* liegt in der Entwicklung von Systemsoftware für Compute-Cluster, die mit sogenannten *System Area Networks (SANs)* verbunden sind. Das Thema besitzt sehr große Aktualität, weil seit kurzem preiswerte SAN-Adapterkarten kommerziell verfügbar sind, mit denen Workstations oder PCs zu massiv parallelen Hochleistungsrechnern verschaltet werden können. Diese Adapterkarten (z.B. Myrinet oder SCI, Abbildung 4.1) bieten sehr hohe Bandbreiten und geringe Latenzzeiten, die durchaus mit der Leistung wesentlich teurerer, dedizierter Parallelrechner vergleichbar sind. Das am PC² im Rahmen einer Industriekooperation entwickelte SCI-Cluster-System auf Basis von Intel Pentium-Prozessoren wird im Jahr 1999

von der Firma Siemens als Standardprodukt für rechenzeitintensive, technisch-wissenschaftliche Anwendungen angeboten.

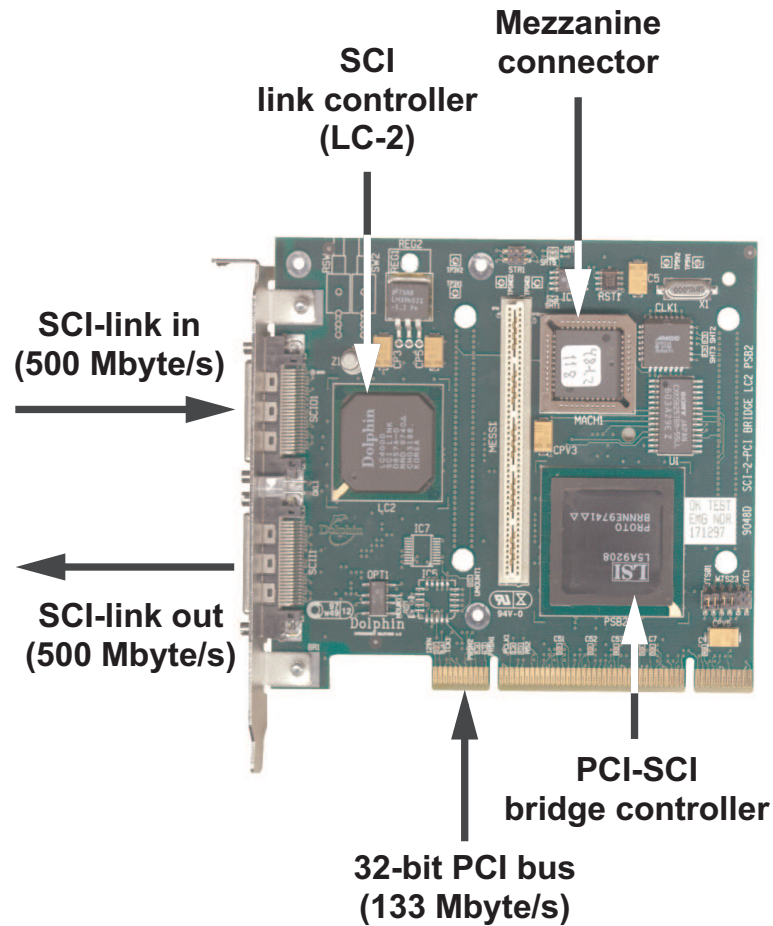


ABBILDUNG 4.1: PCI-Karte

4.2 Hochleistungsrechner

Der *Berliner Landeshochleistungsrechner* ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Es besteht aus den Parallelrechnern Cray T3D (bis September 1998) und Cray T3E sowie dem Vektorrechner Cray J90 im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Hochleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbands (NVV).

Einen Überblick über die im ZIB stehenden Rechnerkomponenten findet man in der Konfigurationsskizze in Abbildung 4.2.

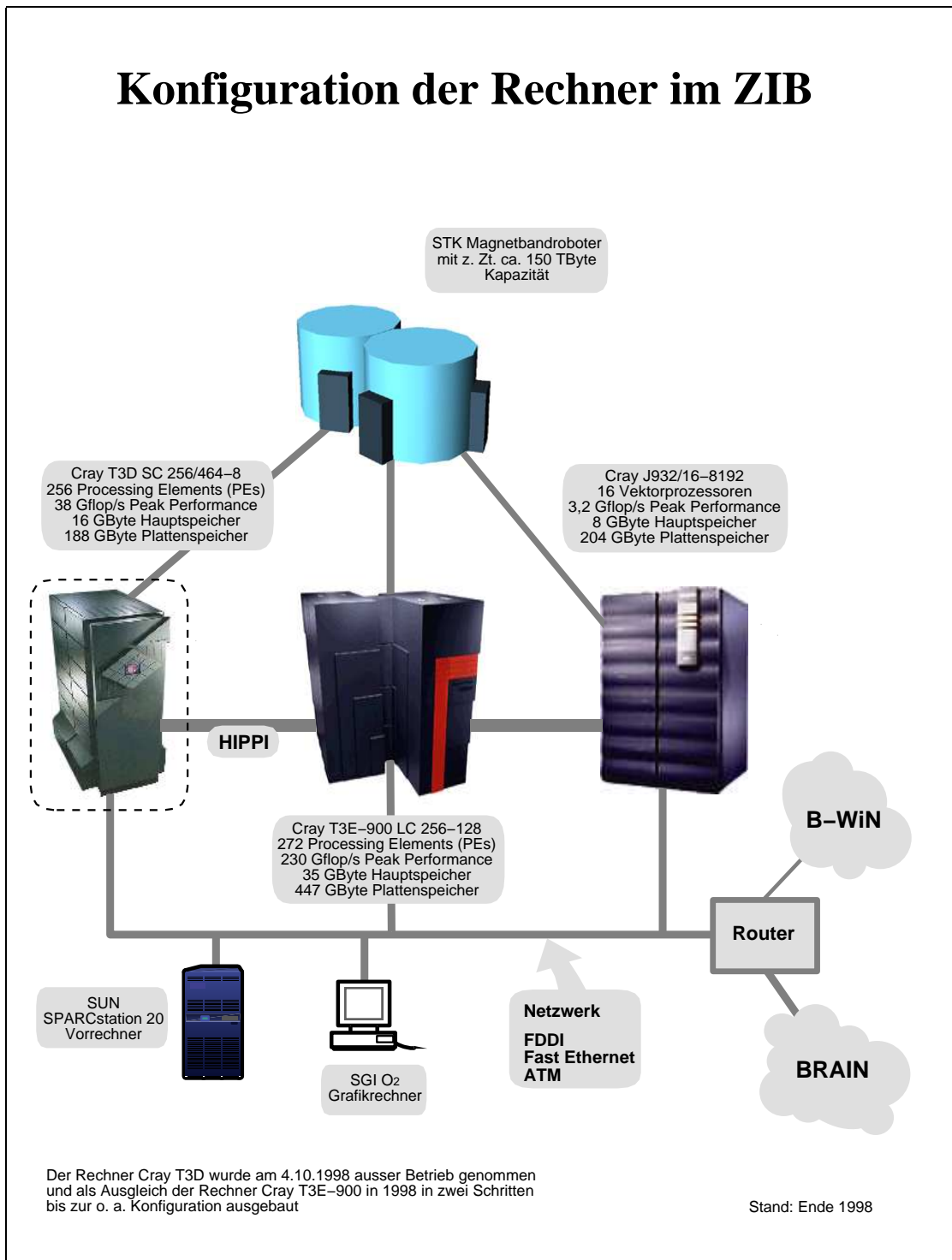


ABBILDUNG 4.2: Konfiguration der Hochleistungsrechner im ZIB

4.2.1 Systemkonfiguration

Einen Überblick über die Systemkonfiguration der Hochleistungsrechner und der Vorrechner liefern die Tabellen 4.1 und 4.2.

	Parallelrechner ^a		Vektorrechner
Zentraleinheit	Cray T3E-900 LC 256-128	Cray T3D SC 256/464-8	Cray J932/16-8192
Prozessoren	272 DEC Alpha EV5.6-21164	256 DEC Alpha EV4-21064	16 Cray J90
Taktfrequenz	450 MHz	150 MHz	100 MHz
Zykluszeit	2,22 ns	6,67 ns	10 ns
Hauptspeicher	264 Prozessoren mit je 128 MB 8 Prozessoren mit je 256 MB	64 MB je Prozessor	8 GB gemeinsamer Speicher
Verbindungs- netzwerk	3-dimensionalen Torus	3-dimensionalen 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	447 GB	188 GB	204 GB
Transferrate	10–50 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 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner

^aDer Parallelrechner Cray T3D wurde am 04.10.1998 außer Betrieb genommen.

Parallelrechner Cray T3D

Im September 1998 wurde der im November 1994 installierte Parallelrechner Cray T3D außer Betrieb genommen, da er im Gegensatz zum Parallelrechner Cray

	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
Taktfrequenz	50 MHz	180 MHz
Zykluszeit	20 ns	5,5 ns
Hauptspeicher	288 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 4.2: Konfiguration der Vorrechner

T3E nur noch mit höherem Aufwand betrieben werden konnte. Die Leistung eines einzelnen Prozessors des Cray T3D (DEC Alpha EV 4-21064, Taktfrequenz 150 MHz, 150 Mflop/s) betrug nur 1/6 gegenüber der des Cray T3E (DEC Alpha EV 5.6-21164, Taktfrequenz 450 MHz, 900 Mflop/s). Der Parallelrechner Cray T3D mit seinen 256 Prozessoren und seiner theoretischen Spitzenleistung (Peak Performance) von 38 Gflop/s war bis zur Installation der NEC SX-4 in der Universität Stuttgart im Jahr 1996 nach den einschlägigen Übersichten über installierte Höchstleistungsrechner¹ der leistungsfähigste Rechner in Deutschland und der erste ausschließlich im wissenschaftlichen Produktionsbetrieb eingesetzte massiv parallele Rechner in Deutschland. Mit diesem Rechner konnte gezeigt werden, daß trotz schwierigerer Programmierung interessierte Forschergruppen bereit sind, massiv-parallele Rechner auf Grund ihrer hohen Leistung intensiv zu verwenden.

Parallelrechner Cray T3E

Der im Februar 1997 installierte und im September 1997 mit schnelleren Prozessoren versehene Parallelrechner Cray T3E konnte im Jahre 1998 mehrfach erweitert werden (die Zahlen in Klammern enthaltenen die Prozessoren mit besonderen Aufgaben):

- Erweiterung der Plattenperipherie um ca. 270 GB auf 447 GB und entsprechende Anpassung der I/O-Bandbreite (Mai 1998), um die I/O-Anforderungen des Rechners Cray T3D mit übernehmen zu können;
- Erweiterung auf 208 (224) Anwendungsprozessoren (September 1998), um die Rechenleistung des abgeschalteten Rechners Cray T3D mit zu übernehmen;

¹Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer, Erich Strohmaier, TOP500 Supercomputer Sites, Rechenzentrum der Universität Mannheim, RUM 42/95, 1995, http://www.top500.org/lists/1995/11/top500_9511.ps

- Erweiterung auf 256 (272) Anwendungsprozessoren (Dezember 1998), um durch verzögerte Bereitstellung der HLRN-Rechner auftretende Engpässe bei der Versorgung unserer Benutzer zu verringern.

Der Parallelrechner Cray T3E des ZIB belegt mit seiner theoretischen Spitzenleistung von 230 Gflop/s in den einschlägigen Übersichten über installierte Höchstleistungsrechner² nach den im Berichtszeitraum durchgeführten Erweiterungen wieder den eindrucksvollen sechsten Platz in Deutschland, die davor liegenden Plätze werden von Rechnern beim Deutschen Wetterdienst, bei der Max-Planck-Gesellschaft (RZ Garching), bei der Universität Stuttgart und beim Forschungszentrum Jülich (zwei Plätze) eingenommen. International liegt das ZIB auf Rang 36.

Die Verfügbarkeit dieses Rechners hat sich gegenüber dem Jahr 1997 (69 Ausfälle) durch Beseitigung von Fehlern in der Hardware und vor allem durch neuere Versionen des Betriebssystem UNICOS/mk im Berichtszeitraum verbessert. Im ersten Halbjahr waren 35 außerplanmäßige Unterbrechungen des Rechenbetriebes (mit 167,3 h Ausfallzeit, 3,8% der Kalenderzeit) zu verzeichnen, im zweiten Halbjahr nur noch 19 außerplanmäßige Unterbrechungen (62,3 h Ausfallzeit, 1,4% der Kalenderzeit). Die Verbesserung ist in erster Linie auf erweiterte Funktionen des Betriebssystems zurückzuführen, da seit Mitte des Jahres einzelne Prozessoren separat wieder gestartet werden können, vorher war bei Ausfall eines Prozessors ein Restart des Gesamtsystems notwendig.

Vektorrechner Cray J90

Die Konfiguration des Vektorrechners blieb im Berichtszeitraum (16 Prozessoren, theoretische Spitzenleistung 3,2 Gflop/s) unverändert. Bei 12 außerplanmäßigen Unterbrechungen mit einer Ausfallzeit von 71,48 h (0,8%), wovon 8 Ausfälle mit einer Ausfallzeit von 47,1 h auf einen Hardwarefehler am Ethernet-Anschluß zurückzuführen sind, kann hier die Verfügbarkeit als sehr gut bezeichnet werden.

Datenhaltungssystem STK 4400

Das Datenhaltungssystem STK 4400 der Fa. StorageTek konnte auf insgesamt 10 Magnetbandgeräte in SD-3-Technik (Helical Scan Technik) erweitert werden, den Benutzern der Hochleistungsrechner sowie für den hausinternen Datensicherungsdienst stehen ca. 3000 Magnetbänder mit je 50 GByte zur Verfügung. Mit der Außerbetriebnahme des Rechners Cray T3D wurden die älteren Magnetbandstationen der 3480- und 3490-Technik mit Magnetbändern der max. Kapazität von nur 800 MByte stillgelegt.

²Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer, Erich Strohmaier, *TOP500 Supercomputer Sites*, 12th Edition, <http://www.top500.org/top500.list.html>

4.2.2 Software-Ausstattung

Die Software auf dem Landeshochleistungsrechner zeichnet sich durch ihre Zuverlässigkeit auf Grund ihres hohen Entwicklungsstandes aus. Zum Teil wurden die Produkte durch neue Versionen aktualisiert. Wegen der angespannten Haushaltssituation wurde auf die Beschaffung neuer kostenpflichtiger Produkte verzichtet (Ausnahme: Chemiepaket TURBOMOLE für den Parallelrechner). Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner liefern die Tabellen 4.3 und 4.4. Da der Parallelrechner Cray T3D Anfang Oktober außer Betrieb genommen wurde, wird er in den Software-Tabellen nicht mehr aufgeführt.

4.2.3 Zulassungsausschuß

Der Ausschuß für die Begutachtung von Rechenzeitanträgen für den Berliner Landeshochleistungsrechner („Zulassungsausschuß des ZIB“) ist ein aus Wissenschaftlern der Berliner und weiterer deutscher Universitäten bestehendes Gremium, das seine Aufgabe in der Unterstützung von förderungswürdigen Forschungsvorhaben mit einem erheblichen Bedarf an Hochleistungsrechner-Ressourcen sieht. Er bewertet die wissenschaftliche Relevanz jedes Großprojektes und die Eignung der Aufgabenstellung für die Lösung mit Hochleistungsrechnern. Auf der Grundlage dieser Bewertung, des begründeten Bedarfs an Ressourcen und der im Norddeutschen Vektorrechner-Verbund (NVV) verfügbaren Kapazität teilt der Ausschuß Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Im Jahre 1998 wurden im ZIB 75 Großprojekte aus den Gebieten Chemie, Ingenieurwissenschaften, Klimaforschung und Physik im Rahmen des NVV mit geeigneten Ressourcen versorgt.

Siehe hierzu URL: <http://www.zib.de/rz/zulassung>.

4.2.4 Großprojekte

Die Tabelle 4.5 liefert einen Überblick über die Verteilung der vom Zulassungsausschuß empfohlenen Großprojekte auf die Fachgebiete.

Die Nutzung des Parallelrechners hat sich 1998 noch stärker in Richtung der Großprojekte konzentriert.

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugeteilten Rechenzeitkontingenten. Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Parallelrechnern (in Klammern jeweils die Werte vom Vorjahr) nahmen die Fachgebiete Physik mit 42% (37%) und Ingenieurwissenschaften mit 33% (37%), gefolgt von den Fachgebieten Geowissenschaften mit 16% (19%) und Chemie mit 9% (7%) in Anspruch.

Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Vektorrechnern (einschließlich der Nutzung der Rechner in Kiel und Hannover – in Klammern jeweils die Werte vom

	Parallelrechner CRAY T3E <i>berte</i>	Vektorrechner CRAY J90 <i>crassus</i>	Vorrechner SUN SPARC <i>ufer</i>	Grafikrechner SGI O2 <i>aventurin</i>
Betriebssystem	UNICOS/mk 2.0	UNICOS 9.0	Solaris 2.5.1	IRIX 6.3
System- Software	DMF 2.5 NQE 3.3	DMF 2.5 NQE 3.3	NQE 3.3	
Compiler	ANSI C 6.1 C++ 3.1 CF90 3.1 HPF 2.4 CAM 2.3	ANSI C 6.0 C++ 3.1 CF77 6.0 CF90 3.1	ANSI C 4.2 C++ 4.2 GCC 2.7 F77 4.2 F90 4.2 NAG F95 1.0	C und C++ 7.1 gcc und g++ 2.7 Fortran 77 und Fortran 90 2.1
Tools	CrayTools 3.1 MPT 1.2 MPICH 1.1	CrayTools 3.1 MPT 1.1 MPICH 1.0 AIT 2.1	MPICH 1.1 PVM 3.3	
Numerik	CrayLibs 3.1 C++ Math 3.0 C++ Tools 3.0 NAG FL 17	CrayLibs 3.1 Aztec 1.1 IMSL 3.0 NAG CL 3 NAG FL 16	Aztec 1.1 NAG CL 4 NAG FL 17 NAG F90 1.0 NAG TextWare	
Visualisierung	CVT 3.1	CVT 3.1 EnSight 6.0 GrADS 1.7 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS	AVS 5.0 AVS/Express 3.1 EnSight 6.0 GrADS 1.7 Khoros 2.1 Mesa 2.4 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS SM 2.4 VTK 1.2	AVS 5.0 AVS/Express 3.1 EnSight 6.0 GrADS 1.7 VTK 1.2
Ingenieur- wissenschaften		ABAQUS 5.7 ADINA 6.1		

Tabelle 4.3: Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner

Parallelrechner CRAY T3E <i>berte</i>	Vektorrechner CRAY J90 <i>crassus</i>		
Ab-initio- Programme	Ab-initio- Programme	Semiempirische Programme	Kraftfeld- Programme
DGauss 4.1 GAMESS (UK) 6.1 TURBOMOLE 4	ACESII 2.0 CADPAC 6.3 ^a CRYSTAL 92 DGAUSS 4.1 ^a GAMESS (UK) 5.2 GAMESS (USA) Gaussian 94 D.2 MOLPRO 96	AMPAC 2.1 MNDO 94 ^a MOPAC 6.02	AMBER 3.0 GROMOS 96

Tabelle 4.4: Chemie-Pakete auf den Hochleistungsrechnern

^ain UniChem 4.1

Herkunft	Chemie	Geowissen- schaften	Ingenieur- wissen- schaften	Physik	Summe
FU Berlin	2	5		6	13
HU Berlin	6			5	11
TU Berlin	18		13	6	37
Berlin	1				1
Bremen			1		1
Halle	1				1
Leipzig	2			1	3
Potsdam	3			3	6
Zeuthen				2	2
Summe	33	5	14	23	75

Tabelle 4.5: Verteilung der Großprojekte auf die Fachgebiete 1998

Vorjahr) nahm das Fachgebiet Chemie mit 55% (50%), gefolgt von den Fachgebieten Physik mit 17% (36%), Geowissenschaften mit 16% (10%) und Ingenieurwissenschaften mit 12% (4%), in Anspruch.

4.3 Fachberatung

Das im Jahresbericht 1996³ eingehend beschriebene Konzept der Fachberatung für die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte als "HPSC-Lotsen" hat sich im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater⁴ des ZIB zugeordnet (siehe Tabelle 4.6).

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

Tabelle 4.6: Fachberater im ZIB

Die wichtigsten Aufgaben der Fachberater sind:

- Hilfe bei der Auswahl des geeigneten Rechners für gegebene Programme unter Berücksichtigung der Hochleistungsrechner im Norddeutschen Vektorrechner-Verbund (NVV) sowie in Jülich (NIC), Stuttgart (HLRS) und Karlsruhe (SSC);
- 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 Anwendungs-Software.

³<http://www.zib.de/bib/jb/JB96/node85.html>

⁴<http://www.zib.de/zibdoc/zib/Fachberater.html>

Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung 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 auch im Berichtsjahr 1998 zusätzlichen Einsatz der Fachberater bei Portierung und Optimierung von Programmen; diese Arbeiten werden durch Dipl.-Ing. Klaus Ketelsen (Silicon Graphics GmbH) wesentlich unterstützt.

4.3.1 Chemie

Die Zahl der Großprojekte im Bereich Chemie hat sich im Vergleich zum Vorjahr um eins erhöht. Aufgrund des traditionellen Bedarfes an Standardprogramm Paketen wurde der überwiegende Anteil (29 Großprojekte) auf den Vektorrechnern abgearbeitet, davon zwei Drittel der Projekte mit deutlich mehr als 1000 Cray J90-CPU-Stunden.

Das erforderliche Angebot von Standardprogramm Paketen wurde mit der Installation der UniChem-Suite (einschl. DGauss) auf dem Vektorrechner Cray J90 sowie der Bereitstellung neuer Versionen von DGauss, GAMESS/UK und erstmalig TURBOMOLE auf dem MPP-System Cray T3E aktualisiert.

Erfreulich ist der zahlenmäßige Zuwachs von Chemieprojekten, die auf den MPP-Systemen Cray T3D und T3E CPU-Zeit abforderten, wobei zwei von ihnen mit insgesamt knapp 30000 PE-Stunden den Hauptanteil im Chemiebereich bilden. Dieser Zuwachs ist einerseits auf die Durchführung umfangreicher Dynamik-Rechnungen zur Beschreibung zeitabhängiger Prozesse in molekularen Aggregaten (AG Manz, Freie Universität Berlin) und andererseits auf die Nutzung des Programmpaketes DGauss für Dichtefunktionalberechnungen von Molekülen (Projekte der Technischen Universität Berlin, insbesondere AG Koch) zurückzuführen.

Der Schwerpunkt der Projektstätigkeit des Fachberaters Chemie beinhaltete die Bereitstellung einer stabilen Produktionsversion von DGauss auf dem Cray T3E (s. u.), so daß schrittweise auf dem Parallelrechner des ZIB eine neue Komplexitätsklasse bei nichtempirischen Molekülsimulationen erschlossen werden konnte.

DGauss/T3E

Bearbeitet von: Thomas Steinke

Kooperationspartner: UniChem/DGauss Group, Oxford Molecular Inc., Beaverton, USA

Mit der weiteren Etablierung von MPP-Kapazität am ZIB kommt der adäquaten Bereitstellung von gut skalierenden Programmpaketen für molekulare Simulationen eine wichtige Bedeutung zu. Aufgrund seiner Leistungsfähigkeit zählt das

DGauss-Programm am ZIB zu diesen strategisch wichtigen Programmen. Daher wurde eine engere Zusammenarbeit mit Oxford Molecular als Entwickler von DGauss angestrebt. Seit Juli existiert eine enge Zusammenarbeit, um T3E-spezifische Verbesserungen im DGauss zu implementieren. Modifizierte DGauss-Versionen konnten so, auch dank der Hilfe durch den lokalen SGI/Cray-Analysten Klaus Ketelsen, schnell den T3E-Nutzern zur Verfügung gestellt werden.

RAMAN-Spektren

Bearbeitet von: Thomas Steinke

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

Am MBI werden mit experimentellen und theoretischen Methoden Moleküle mit nichtlinearen optischen Eigenschaften untersucht. Um Strukturinformationen über ausgewählte angeregte Zustände des Diphenylhexatrien zu erhalten, wurden semi-empirische Berechnungen durchgeführt. Die berechneten Schwingungsmoden und Strukturdaten ergänzen die Ergebnisse der CARS-Messungen bei der Interpretation zeitabhängiger Prozesse im angeregten Zustand des Diphenylhexatrien [1] (siehe auch Projekt IIe.5 des MBI⁵).

Publikationen

- [1] S. Hogiu, W. Werncke, M. Pfeiffer, A. Lau, T. Steinke, *Picosecond time-resolved CARS spectroscopy of a mixed excited singlet state of diphenylhexatriene*, Chem. Phys. Lett. 287 (1998) 8-16.

4.3.2 Geowissenschaften

Das Fachgebiet Geowissenschaften umfaßt die Projekte aus dem Bereich Umweltwissenschaften einschließlich dessen Randgebiete Meteorologie, Klimaforschung, Atmosphärenforschung und Meereskunde. Die Anzahl der Großprojekte hat sich um eins verringert, die in Anspruch genommene Rechenzeit ist insgesamt ungefähr gleich geblieben.

Das neue Projekt befaßt sich mit der Ausbreitung von Luftschadstoffen und hatte in seiner ersten „heißen“ Phase in den Sommermonaten bei der Durchführung unterstützender Rechnungen zur Feldmeßkampagne *BERLIOZ* besondere Anforderungen an die zeitliche Abarbeitung. Durch besondere Schedulingmaßnahmen auf dem Parallelrechner Cray T3E konnte sichergestellt werden, daß die Rechenläufe in einem vorgegebenen engen Zeitfenster nach Vorliegen der extern erzeugten Eingabedaten gestartet und rechtzeitig zum täglichen Termin der graphischen Auswertung beendet werden konnten.

⁵<http://www.mbi-berlin.de/de/forschung/projekte/IIe/IIe5/ie5d.htm>

Das im Jahr 1997 am ZIB portierte Ozean-Modell MOM wurde im Berichtsjahr weiter hinsichtlich Rechengeschwindigkeit, Speicherbedarf und I/O optimiert und wird im Rahmen des NVV sehr erfolgreich vom Institut für Meereskunde in Kiel in Kooperation mit dem Alfred-Wegener-Institut Bremerhaven für große Produktionsläufe eingesetzt. Der Einsatz des Parallelrechners ermöglichte Untersuchungen in einer Größenordnung, die vorher nicht durchführbar gewesen wären. Das Projekt zählt zu den größten Rechenzeitabnehmern auf dem Parallelrechner.

4.3.3 Ingenieurwissenschaften

Die Anzahl der Projekte hat sich im Berichtszeitraum mit 14 verdoppelt. Die abgenommene Rechenzeit hat sich insgesamt auf hohem Niveau stabilisiert. Die Projekte aus den Ingenieurwissenschaften lassen sich in zwei Gruppen einteilen. Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) benutzen zum überwiegenden Teil den Parallelrechner und arbeiten mit selbstgeschriebenen Forschungscode. Der aerodynamische Entwurfscode FLOWer wird seit seiner Portierung auf den Rechner Cray T3E im Jahr 1997 beständig und erfolgreich für Produktionsläufe mit bis zu 6,8 Mio. Punkten auf 129 Prozessoren eingesetzt. 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 soll es ermöglichen, 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.

4.3.4 Physik

Im Bereich der Physik hat sich die Zahl der bearbeiteten Großprojekte im Vergleich zum Vorjahr von 18 auf 23 erhöht. Dabei ist ein deutlicher Trend vom Vektorrechner weg hin zum Parallelrechner zu erkennen. Die Physiker haben die zur Verfügung stehenden Vektorrechner weniger als halb so viel benutzt wie im

Vorjahr. Auf den Parallelrechnern haben die Physikprojekte den größten Rechenzeitanteil unter den Fachbereichen abgenommen.

Die Aufteilung des Rechenzeitverbrauchs unter den verschiedenen Gebieten der Physik ist im wesentlichen unverändert geblieben. Aus den Bereichen Astrophysik und Gitterfeldtheorie wird deutlich mehr Rechenzeit in Anspruch genommen als in den Bereichen Statistische Physik und Festkörperphysik.

Diesem Überblick über die Entwicklung der Physikprojekte folgt eine kurze Darstellung der wissenschaftlichen Aktivitäten des Fachberaters.

Gitterfeldtheorie

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

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

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. 1998 wurden früher begonnene Arbeiten zur Quantenelektrodynamik (QED) und Quantenchromodynamik (QCD) fortgeführt. Wichtigste Neuentwicklung ist die Implementierung eines Hybrid-Monte-Carlo-Programms zur Simulation der QCD mit dynamischen Wilson-Fermionen auf dem Parallelrechner Cray T3E.

Publikationen

- [1] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Is there a Landau Pole Problem in QED?*, Phys. Rev. Lett. 80 (1998), 4119–4122.
- [2] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Resolution of the Landau pole problem in QED*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 694–696.
- [3] A. Hofericher, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker und H. Stüben, *Dynamical Wilson fermions and the problem of the chiral limit in compact lattice QED*, Phys. Rev. D58 (1998), 114505.
- [4] A. Hofericher, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker und H. Stüben, *Effects of dynamical Wilson fermions and the phase structure of Compact QED₄*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 454–456.
- [5] 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, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 179–181.

4.4 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 der Bestand an Workstations modernisiert und erweitert. Dabei wurde Wert darauf gelegt, alle neuen Maschinen mit einem der heutigen Software angepaßten Ausbau zu beschaffen. Dazu zählen eine hochwertige Grafik, 21" Monitor und als Minimum 128 MB Hauptspeicher. Bei den neuen Rechnern handelte es sich sowohl um Unix Rechner, als auch PCs unter Windows NT und Linux, sowie um Rechner vom Typ Macintosh. Bei den PCs wurden die Abteilungen zur Erhöhung der Arbeitsflexibilität zusätzlich auch mit Abteilungs-Notebooks versorgt. Diese Maßnahme zur möglichst kostengünstigen, dabei aber technisch angemessenen Ausstattung bei Vorträgen und Reisen hat sich bereits bewährt. Bezüglich der Möglichkeit von Farbausdrucken wurde das Konzept der zentralen Druckausgabe um lokale Farbdrucker in den Abteilungen ergänzt, womit dem steigenden Bedarf von schnell verfügbaren Farbausdrucken mittlerer Qualität, z.B. auch für Vortragsfolien, Rechnung getragen wurde.

Im Bereich der Rechnernetze galt es, verschiedene Anforderungen zu erfüllen. So war der Bedarf an Fast-Ethernet Anschlüssen für Arbeitsplatzrechner stark gestiegen. In 1998 wurden die Voraussetzungen für einen Betrieb mit 622 Mbps auf dem ATM Backbone geschaffen und die Einführung von MPOA vorgenommen. Dies konnte erreicht werden, indem die vorhandenen LAN Switches durch neuere Modelle ersetzt wurden. Durch diese Erweiterungen kann jetzt jedem Arbeitsplatzrechner ein dedizierter Anschluß mit garantierter Bandbreite in unserem Switched Network angeboten werden. Dies ist nicht zuletzt auch im Hinblick auf die immer stärkere Dynamik der Struktur durch kurzzeitig oder an wechselnden Orten eingesetzte Rechner (z.B. Notebooks) die Grundlage für mehr Flexibilität und eine verbesserte Sicherheit.

Neben der Hauptaufgabe der Abteilung, dem Service innerhalb des Hauses, wurden erstmalig auch technisch-wissenschaftliche Projekte begonnen. So hat die Teilnahme als eine der Pilotinstallationen im Corporate Network des DFN (Fernsprechen im Breitband-Wissenschaftsnetz) als Nebenwirkung zu einer deutlichen Reduzierung unserer Fernsprechkosten geführt.

4.5 Projekte des Bereiches Computer Science

4.5.1 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Kooperationspartner: Rechenzentren der Freien Universität Berlin, der Humboldt-Universität zu Berlin und der Technischen Universität Berlin

Nachdem im Jahr 1997 der Berliner Anschluß an das Breitband-Wissenschaftsnetz (B-WiN) des DFN-Vereins auf 155 Mb/s erweitert und das Glasfasernetz in Zusammenarbeit mit dem Landesbetrieb für Informationstechnik (LIT) stark ausgebaut wurde, waren die Schwerpunkte des Jahres 1998:

- Regelbetrieb und Kapazitätsausschöpfung des B-WiN-Hauptanschlusses mit 155 Mb/s;
- Erweiterungen des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT;
- Bereitstellen von Netzverbindungen zwischen den im Stadtgebiet verstreut liegenden Standorten von Wissenschaftseinrichtungen;
- Verknüpfung des Berliner Wissenschaftsnetzes mit dem Potsdamer Wissenschaftsnetz.

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

Die Verträge der Wissenschaftseinrichtungen mit dem DFN-Verein basieren auf dem Modell des Gemeinschaftsanschlusses, an dem sämtliche größeren Berliner Wissenschaftseinrichtungen mit Teilbandbreiten von 1 Mb/s bis 34 Mb/s beteiligt sind. Weitere Wissenschaftseinrichtungen 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 Standard-Vertrag sind die Verantwortlichkeiten für Zuleitungen (von der jeweiligen Einrichtung zum Hauptanschluß in der Freien Universität Berlin) unter Hinweis auf die Infrastruktur des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN (Berlin Research Area Information Network) sowie der Netzbetrieb innerhalb Berlins einschließlich einer Umlage der Kosten für Geräte und Management geregelt. Die BRAIN-Planungsgruppe, bestehend aus vier Mitarbeitern der Berliner Universitäten und des ZIB, eingerichtet von der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur, mit ihrer Geschäftsstelle im ZIB, ist für Planung und Betreuung dieser Zugänge zuständig.

Siehe hierzu URL: <http://www.brain.de>.

Die Kapazität des Berliner Gemeinschaftsanschlusses mit 155 Mb/s ist inzwischen vollständig verteilt; für weitere Interessenten ist eine Warteliste aufgestellt worden. Eine Verstärkung der Kapazität ist im Frühjahr 1999 nach Inbetriebnahme

der Verbindung Berlin–Potsdam vorgesehen.

Erweiterungen des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT

Die technische Grundlage von BRAIN (siehe Abbildung 4.3) 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 1998 ist das Netz nur noch geringfügig erweitert worden, hervorzuheben sind die Anschlüsse für die Physikalisch-Technische Bundesanstalt, für das Max-Planck-Institut für Bildungsforschung, für die Kunsthochschule Berlin (teilweise als Funkverbindung), für das Wissenschaftszentrum Berlin, für die Landesbildstelle und für weitere Nebenstandorte der Freien Universität Berlin.

Mit Beginn des Jahres 1998 ist nach dem Beschluß des Senats von Berlin vom 05. August 1997 das bisherige Landesamt für Informationstechnik (LIT) in den Landesbetrieb für Informationstechnik (ebenfalls: LIT) nach §26 der Berliner Landeshaushaltsordnung überführt worden. Damit ist beabsichtigt, diesen Betrieb als zentralen Dienstleister für die Berliner Verwaltung in Bezug auf Rechenzentren, Netzinfrastruktur und IT-Service aufzubauen und in Hinblick auf die Wirtschaftlichkeit, den Service und die Qualität im internen und externen Vergleich wettbewerbsfähig zu machen. Dies bedeutet u.a., daß künftig das Lichtwellenleiter-Netz nicht mehr ohne Betriebskostenbeteiligung der Wissenschaft bereit gestellt wird. Ende des Jahres 1998 sind mit dem LIT Gespräche aufgenommen worden, um die vertraglichen Regelungen dieser Neuregelung anzupassen.

Bereitstellen von Netzverbindungen zwischen den im Stadtgebiet verstreut liegenden Standorten von Wissenschaftseinrichtungen

Im Laufe des Jahres 1998 ist begonnen worden, verstreut liegende Standorte von Wissenschaftseinrichtungen unabhängig von dem vom DFN betriebenen B-WiN-Zubringernetz zu verbinden (*Classical BRAIN*). Mit Hilfe dieses Dienstes werden zur Zeit die entfernt liegenden Standorte des Hahn-Meitner-Instituts (Wannsee, Adlershof), der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (Lichterfelde, Adlershof) und des Forschungsverbunds Berlin (Mitte, Adlershof) kostengünstig verbunden. Zum Einsatz kommen hier vorhandene ältere Netzgeräte (Router, ATM-Switche), der Betrieb dieses Netzes wird in Kooperation der nutzenden Einrichtungen mit den das BRAIN tragenden Einrichtungen (FUB, HU, TUB, ZIB) durchgeführt.

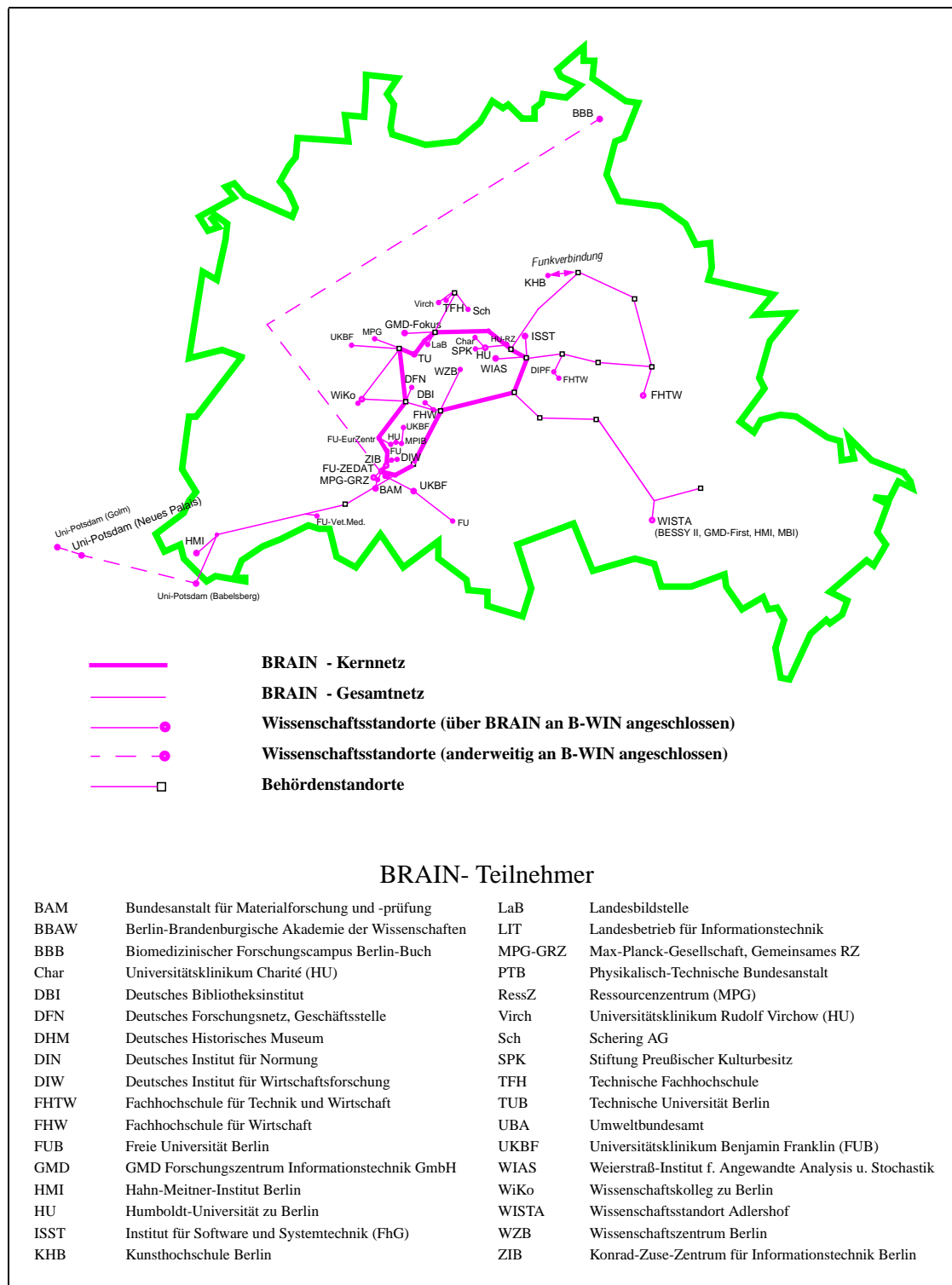


ABBILDUNG 4.3: Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Verknüpfung des Berliner Wissenschaftsnetzes mit dem Potsdamer Wissenschaftsnetz

Am 16. Oktober 1997 ist das Potsdamer Wissenschaftsnetz offiziell in Betrieb gegangen. Es verbindet die wichtigen in Potsdam gelegenen Wissenschaftseinrichtungen untereinander auf LWL-Strecken, die von der EVP (Energieversorgung Potsdam) 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. An den Baukosten in Höhe von ca. 120 TDM haben sich neben den beiden Ländern auch die Max-Planck-Gesellschaft und die Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften beteiligt.

Von der Verbindung beider Netze werden sowohl die Berliner als auch die Potsdamer Wissenschaftseinrichtungen profitieren:

- Weitere Berliner Einrichtungen können am B-WiN-Gemeinschaftsanschluß teilnehmen, da die Berliner und die Potsdamer Einrichtungen gemeinsam zwei Hauptanschlüsse zu je 155 Mb/s nutzen werden, der Hauptanschluß in Potsdam wird auf 155 Mb/s aufgerüstet.
- Durch gemeinsame Nutzung beider Hauptanschlüsse wird eine höhere Verfügbarkeit erreicht, z.B. kann bei Ausfall der Infrastruktur an einem Hauptanschluß der andere Hauptanschluß – nur in der Gesamtkapazität eingeschränkt – die Netzverbindungen weiterhin realisieren.
- Obwohl die Universitäten und Wissenschaftseinrichtungen in Berlin und Potsdam zwei unterschiedlichen Bundesländern angehören, arbeiten die Wissenschaftler eng zusammen. Damit gehen Anforderungen an höhere Bandbreite zwischen diesen Einrichtungen einher, so wie sie bereits jetzt zwischen den Berliner Universitäten über BRAIN gewährleistet sind. Diese können in einem gemeinsamen Netz kostengünstiger als über B-WiN realisiert werden. In der Planung sind Projekte wie Vorlesungen über das Netz und Austausch von Bewegtbildern.
- Es bilden sich regionale Strukturen bei bundesweit existierenden Forschungseinrichtungen heraus, z.B. werden die Max-Planck-Institute in Berlin und Potsdam über diese neue Strecke direkt untereinander verbunden.

Die Bauarbeiten für die LWL-Strecke waren im November 1998 erfolgreich abgeschlossen. Im Januar 1999 werden gemeinsam mit dem DFN-Verein die Wissenschaftsnetze von Berlin und Potsdam gekoppelt werden und der Netzverkehr wird versuchsweise aufgenommen. Die offizielle Betriebsaufnahme ist unter Beteiligung der beiden Landesregierungen für Ende März 1999 vorgesehen.

4.5.2 Gigabit-Testbed Projekt des DFN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Förderung: DFN-Verein, BMBF, Deutsche Telekom

Gesteigerter Bandbreitenbedarf und wachsende Dienstgüteanforderungen einzelner Anwendungen, die mit dem derzeit verfügbaren Breitband-Wissenschaftsnetz B-WiN nicht bedient werden können, sind ein ausschlaggebender Grund, den Schritt in eine zukünftige Gigabit-Technik zu planen. Unter diesem Gesichtspunkt fördert der DFN-Verein mit Mitteln des BMBF dazu zwei Projekte, das Gigabit Testbed-West und auch das Gigabit-Testbed Süd+Berlin, mit dem Ziel, die nächste Stufe der Hochgeschwindigkeitskommunikation in Deutschland durch den Einsatz fortschrittlicher Netztechnologien und durch zukunftsweisende, innovative Anwendungen vorzubereiten.

Seit Sommer 1997 besteht im Gigabit-Testbed West eine Höchstgeschwindigkeits-Datenverbindung zwischen dem Forschungszentrum Jülich und der GMD-Forschungszentrum Informationstechnik GmbH in Sankt Augustin-Birlinghoven. Betrieben wird diese rund 110 km lange Verbindung von der Telekommunikationsgesellschaft o.tel.o, zunächst mit 622 Mb/s, seit August 1998 mit 2,4 Gb/s.

Die Deutsche Telekom hat für das Gigabit-Testbed Süd+Berlin die notwendige Infrastruktur zur Verfügung gestellt. Zur Verbindung der Standorte München und Erlangen (ca. 200 km) wird hier innovative Technik in Form von optischen Wellenlängenmultiplexern (Wave-Division-Multiplexer, WDM) eingesetzt. Benutzt werden Systeme vom Typ T31 der Firma Pirelli, von möglichen 8 Kanälen mit einer Übertragungsrate von 2,5 Gb/s stehen derzeit 3 Kanäle zur transparenten Nutzung innerhalb des Gigabit-Testbed Süd+Berlin zur Verfügung.

Im Dezember 1998 konnte diese Glasfaserverbindung, ebenfalls in WDM-Technik, über Erlangen hinaus bis nach Berlin verlängert werden (ca. 500 km). Damit können gemeinsame Netzprojekte zwischen Bayern und der Region Berlin/Potsdam in Angriff genommen werden. Der Auflagepunkt für die Überlandstrecke befindet sich beim EANTC in der Technischen Universität Berlin.

Im Berliner Raum kann das LWL-Netz von BRAIN genutzt werden. Auf separaten Glasfasern werden ausgehend von der TUB Strecken zu GMD-Fokus (in Moabit) und von dort weiter zum Wista-Gelände in Adlershof zur Anbindung der Humboldt-Universität (Fachgebiet Informatik) und dem DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) bereitgestellt. Eine zweite Strecke führt von der TUB über Dahlem (ZIB und MPG-GRZ) bis zur Universität Potsdam (s. Abbildung 4.4).

Im Rahmen des Projekts Gigabit-Testbed Süd+Berlin wird die Zusammenarbeit und dabei u.a. der Austausch großer Datenmengen zwischen räumlich weit entfernten wissenschaftlichen Einrichtungen erprobt werden:

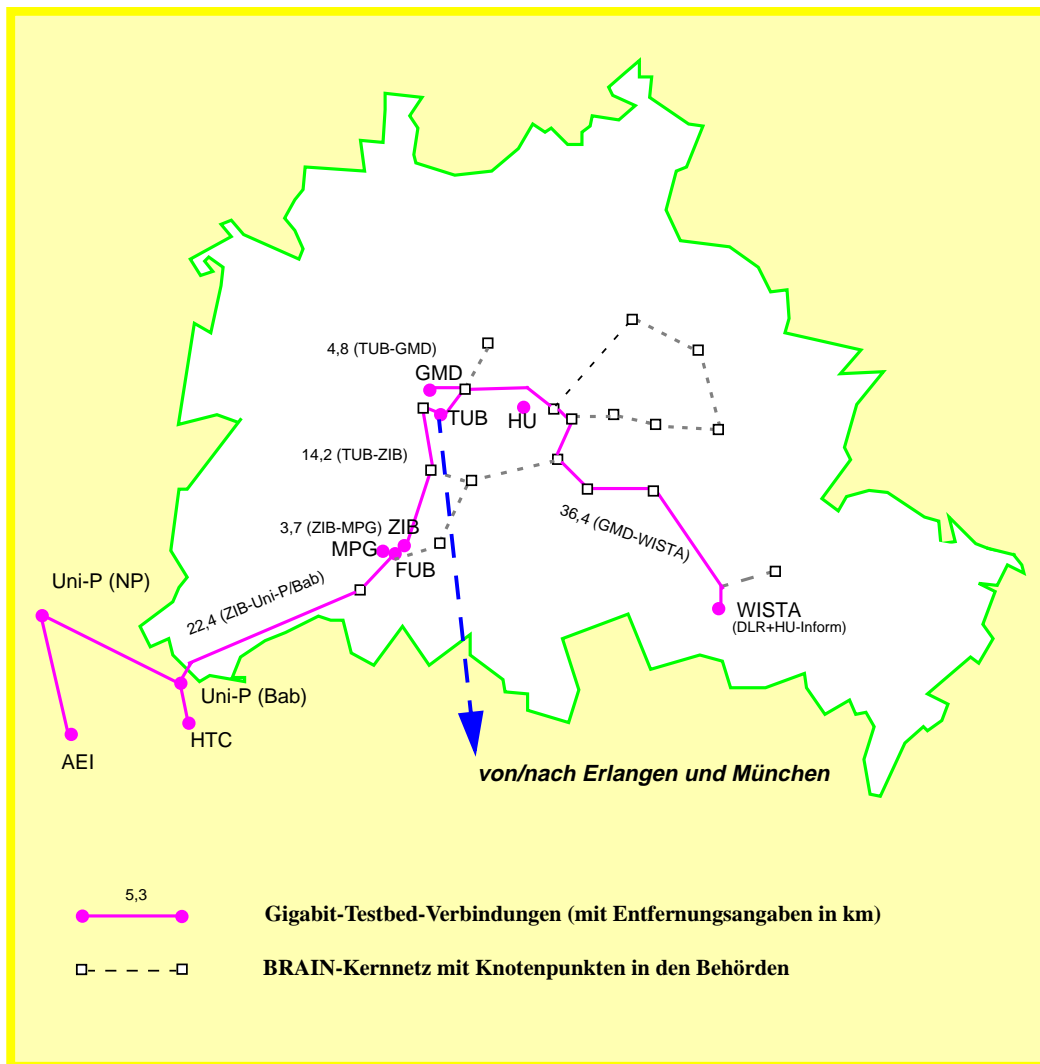


ABBILDUNG 4.4: Gigabit-Testbed Süd+Berlin, Region Berlin

Projekte des Gigabit-Testbed Süd+Berlin in der Region Berlin

- DIANA: Distance Learning im Gigabit-Testbed; Humboldt-Universität zu Berlin, Technische Universität München;
- FIGARO: Fernerkundung im Gigabit-Netz – Automatische Rekonstruktion von Oberflächen; Technische Universität Berlin, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Universität München;
- Giga-Media: Kursproduktion für Film + Fernsehen – noch in Vorbereitung;
- GÜTE: Gigabit-Übertragungstechniken in der Evaluation; ZIB, Technische Universität Berlin (EANTC);
- KoMaB: Koordinierungsmanagement Berlin; ZIB;
- Meta: Metacomputing durch Kopplung von Hochleistungsrechnern; Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft, ZIB, LRZ München, Universität Stuttgart, weitere Institute der MPG;
- Tele: Tele Teacher Coaching (Sporttraining und -ausbildung); Technische Universität Berlin, Technische Universität München, Universität Erlangen;
- TIKSL: Tele Immersion: Kollision Schwarzer Löcher; Albert-Einstein-Institut (MPG) Potsdam, ZIB, Rechenzentrum Garching der MPG (siehe dazu Kapitel 2.2.7);
- ViSpaS: Visualisierung von Oberflächenreaktionen; Fritz-Haber-Institut (MPG), Rechenzentrum Garching der MPG.

Die Projekte, an denen der Bereich Computer Science beteiligt ist, werden im Folgenden näher beschrieben.

KoMaB (Koordinierungsmanagement Berlin)

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Das Teilprojekt *KoMaB (Koordinierungsmanagement Berlin)* wird die in Berlin und Potsdam tätigen Anwendungsprojekte betreuen und ihre Arbeit regional, wie auch im Verhältnis zu den Projektpartnern in Bayern, koordinieren. Das Projekt konnte zum 01. November 1998 beginnen.

GÜTE (Gigabit-Übertragungstechniken in der Evaluation)

Bearbeitet von: Wolfgang Pyszkalski

Im Rahmen von GÜTE werden in enger Kooperation mit dem entsprechenden Bayerischen Technikprojekt zunächst die technischen Grundlagen für die Anwendungsprojekte des Gigabit Testbed geschaffen und Erkenntnisse zum Aufbau eines qualitativ hochwertigen und performanten Gigabit-Wissenschaftsnetzes in Deutschland gewonnen. Das Projekt GÜTE wird vom Bereich Computer Science

des ZIB, Abteilung IRZ gemeinsam mit dem EANTC der Technischen Universität Berlin durchgeführt. Das Projekt wird Anfang 1999 die inhaltliche Arbeit aufnehmen.

Meta (Metacomputing durch Kopplung von Hochleistungsrechnern)

Bearbeitet von: Thomas Steinke

Durch Kopplung von Supercomputern beim ZIB, beim RZG (Garching) und beim LRZ (München) soll mit Hilfe von vier Anwendungsprogrammen aus den Gebieten Astrophysik, Materialforschung, Chemie und Polymerphysik eine Meta-Computing Studie durchgeführt werden, wobei verschiedene Aspekte des Metacomputings untersucht werden.

Im Bereich Computer Science des ZIB, Abteilung Höchstleistungsrechner wird die Chemie-Anwendung GAMESS für diesen Zweck untersucht und auf den drei Supercomputern (zwei Parallelrechner Cray T3E, ein Vektorrechner Siemens VPP 700) verteilt zum Laufen gebracht, außerdem werden die organisatorischen Fragen zum Ablauf von verteilten Rechnungen zwischen diesen drei Systemen in Absprache mit den Projektpartnern diskutiert und geklärt. Das Projekt wird Anfang 1999 beginnen.

4.5.3 UNICORE

Bearbeitet von: Alexander Reinefeld, Hinnerk Stüben

Das Ziel des Projektes UNICORE⁶ (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.

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 hat an folgenden Komponenten des UNICORE-Systems mitgewirkt: graphische Benutzerschnittstelle, nahtlose Programmierumgebung, Datei-Transfer, Benutzerhandbuch.

⁶<http://www.kfa-juelich.de/zam/RD/coop/unicore>

4.5.4 Metacomputing über den Atlantik

Bearbeitet von: Hubert Busch, Wolfgang Häusler, Barbara Märschenz, Wolfgang Pyszkalski

Kooperationspartner: Edward Seidel, Albert–Einstein–Institut (AEI), Potsdam; Hermann Lederer, Rechenzentrum Garching (RZG), MPG

Im Berichtszeitraum beteiligte sich das ZIB an umfangreichen Demonstrationen zum verteilten Rechnen über den Nordatlantik, die das Albert-Einstein-Institut in Potsdam in Zusammenarbeit mit weiteren Projektpartnern in Deutschland und den USA durchführte (siehe dazu auch Kapitel 2.2.7).

Das Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI, (siehe auch AEI⁷), wurde 1995 gegründet mit dem Ziel, Forschungen insbesondere auf dem Gebiet der Allgemeinen Relativitätstheorie und der Quantengravitation durchzuführen. Die Einsteinschen Gleichungen, die die Wechselwirkungen von Gravitationswellen und Materie beschreiben, gehören zu den komplexesten Gleichungen der Physik und können, außer in sehr einfachen Fällen, nur noch mit den leistungsstärksten Computern gelöst werden – dies 80 Jahre nach der Veröffentlichung der Allgemeinen Relativitätstheorie.

Die Arbeitsgruppe um Edward Seidel im AEI demonstrierte im Mai 1998 auf der *Alliance'98*-Konferenz in Champaign, Illinois (USA) die interaktive 3D-Visualisierung einer Simulation von Gravitationswellen, die Berechnungen liefen zeitgleich auf dem Cray T3E des ZIB ab.

Im November 1998 demonstrierte diese Gruppe auf der *Supercomputing'98* in Orlando, Florida, die verteilte Berechnung der Kollision zweier Neutronensterne auf insgesamt drei Superrechner (SDSC, San Diego, California; RZG, Garching, Deutschland; ZIB). Eingesetzt wurde Software aus dem *Globus-Projekt* der Argonne National Laboratories (Champaign, Illinois, USA), mit der sonst nur auf einem Rechner lokal arbeitende Programme verteilt auf entfernt stehenden Rechnern gleichzeitig laufen können.

Am Aufbau der dediziert geschalteten direkten 10 Mb/s-ATM-Verbindungen waren sechs Telefongesellschaften bzw. Netzwerkpartner beteiligt, die die entsprechenden Ressourcen für die Vorführungen kostenlos zur Verfügung stellten: das ZIB mit dem von ihm betreuten Hochleistungsnetzwerk BRAIN, GMD Focus mit ihrem Anschluß an das Netz der Deutschen Telekom, die Deutsche Telekom Berkomp GmbH mit Netzverbindungen von Berlin nach Garching und Sylt, Teleglobe Canada Inc. mit ihrem transatlantischen Glasfaserkabel nach Pennan Point in Neuschottland, CANARIE Inc. mit ihrem experimentellen Netzwerk bis nach Chicago, und schließlich der vBNS (very high-performance Backbone Network Service) mit dem letzten Teilstück zum NCSA – dem National Center for Supercomputing Applications in Champaign (Illinois) bzw. zum SCSD, Super-

⁷<http://www.aei-potsdam.mpg.de/>

computer Center San Diego, California und zum Gelände der *Supercomputing'98* in Orlando, Florida.

Das ZIB war maßgeblich am Zustandekommen der Netzverbindungen und dem Aufbau der Demonstration beteiligt; außerdem führte es umfangreiche Netzwerktests und Optimierungen durch.

Weitere Hinweise in Kapitel 2.2.7 sowie unter Alliance-Projekt⁸ und Supercomputing-Projekt⁹.

4.6 Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren

4.6.1 Norddeutscher Vektorrechner-Verbund (NVV)

Seit 1984 praktizieren die Länder Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein eine Verwaltungsvereinbarung, die die gemeinsame Nutzung und abgestimmte Neubeschaffung ihrer jeweiligen Landeshochleistungsrechner sicherstellt. Der dadurch begründete Norddeutsche Vektorrechner-Verbund (NVV) hat in den vergangenen 14 Jahren bewirkt, daß zu jeder Zeit an mindestens einem der drei Standorte Berlin, Hannover und Kiel ein moderner Hochleistungsrechner 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 Landeshochleistungsrechner nicht mehr ausreichen. Im Rahmen des NVV stehen den Berliner Projekten neben den Berliner Hochleistungsrechnern die in Tabelle 4.7 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	16.500 ZPL
	CRAY T3E	136 - 256	900 Mflop/s	56.000 ZPL

Tabelle 4.7: Berliner Anteil an den Hochleistungsrechnern im NVV (1 ZVL = 1 CPU-h J90, 1 ZPL = 64 PE-h T3D bzw. 16 PE-h T3E). Die Zahlen unter Berliner Anteil berücksichtigen die jeweilige Standzeit der Konfiguration im Berichtszeitraum.

⁸<http://jean-luc.aei-potsdam.mpg.de/Alliance98/>

⁹<http://jean-luc.aei-potsdam.mpg.de/SC98/>

4.6.2 Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)

Auf der Basis der jahrelangen Erfahrungen im Norddeutschen Vektorrechner-Verbund 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). Im Laufe des Jahres 1998 haben fünf der beteiligten Landesregierungen einem Verwaltungsabkommen mit dem Ziel zugestimmt, „... die gemeinsame Förderung des Höchstleistungsrechnens in der Absicht, die bestehende regionale Infrastruktur in Wissenschaft und Wirtschaft durch den Aufbau und Betrieb eines verteilten Norddeutschen Zentrums für Höchstleistungsrechnen als gemeinsame Verbundaufgabe zu verbessern“. In dieser Verwaltungsvereinbarung werden Fragen über Finanzierung, Betrieb und Nutzung eines solchen Systems sowie über Forschungsförderung und der Nutzung des in der erweiterten Region vorhandenen Wissens (Kompetenznetzwerk) geregelt.

In ausführlichen Benutzerbefragungen haben die Rechenzentren dieser sechs Länder den Bedarf für ein solches System, welches sich in der Leistung an den derzeit in den USA im Rahmen der *Accelerated Strategic Computer Initiative* (ASCI) installierten Systeme orientiert, nachgewiesen.

Der Wissenschaftsrat setzte im Frühjahr 1998 eine Arbeitsgruppe *Höchstleistungsrechner* ein, die sich im Laufe des Jahres in mehreren Sitzungen mit den ihr vorliegenden Anträgen auf Beschaffung entsprechender Systeme sowohl aus Bayern als auch aus dem Nordverbund befaßt. Bis Ende 1998 hat der Wissenschaftsrat in dieser Angelegenheit noch nicht entschieden.

4.6.3 Zusammenarbeit mit anderen Hochleistungsrechenzentren in Jülich, Stuttgart und Karlsruhe

Das ZIB arbeitet mit anderen Hochleistungsrechenzentren, dem neugegründeten John von Neumann-Institut für Computing (NIC), einer gemeinsamen Einrichtung der beiden Großforschungsinstitute FZ Jülich und DESY (bislang Höchstleistungsrechenzentrum Jülich – HLRZ) und den in Baden-Württemberg ansässigen Zentren (Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart – HLRS und Scientific Supercomputing Center Karlsruhe – SSC in Karlsruhe) zusammen. Die Vorsitzenden der jeweiligen Ausschüsse zur Vergabe von Rechenzeiten treffen sich regelmäßig. Darüber hinaus arbeiten Mitarbeiter dieser Zentren gemeinsam im Projekt UNICORE (vgl. Abschnitt 4.5.3) an einer Vereinfachung und Vereinheitlichung des Zugangs zu Höchstleistungsrechnerressourcen.

Das ZIB informierte die Projektleiter der Berliner Großprojekte über die Bereitstellung der Rechenmöglichkeiten bei diesen Zentren (NIC: Parallelrechner Cray T3E-600 mit 512 Prozessoren und Parallel-Vektor-Prozessorsystem Cray T90 mit 16 Prozessoren; HLRS: Vektorrechner NEC SX-4/32 und Parallelrechner Cray T3E-900 mit 512 Prozessoren; SSC: Parallelrechner IBM RS/6000 SP mit 256 Knoten). Die Fachberater des ZIB unterstützen die Berliner Benutzer auch beim Einsatz dieser Rechner für die Bearbeitung ihrer Projekte.

Im Jahr 1998 wurden die Rechner des HLRS (Stuttgart) von drei Berliner Projekten und die des NIC (Jülich) von zwei Berliner Projekten in Anspruch genommen.

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 98-01. Thomas Wolf. *A Study of Genetic Algorithms solving a combinatorial Puzzle.*

Abstract: The suitability of Genetic Algorithms (GAs) to solve a combinatorial problem with only one solution is investigated. The dependence of the performance is studied for GA-hard and GA-soft fitness functions, both with a range of different parameter values and different encodings.

SC 98-02. Harald Böing; Wolfram Koepf. *Algorithms for q -hypergeometric Summation in Computer Algebra.*

Abstract: In this paper we present a short description of q -analogues of Gosper's, Zeilberger's, Petkovšek's and related algorithms. Furthermore we introduce our corresponding MAPLE implementations and show how they can be applied to prove or even derive identities associated with q -series.

SC 98-03. Peter Deuffhard; Wilhelm Huisinga; Alexander Fischer; Christof Schütte. *Identification of Almost Invariant Aggregates in Reversible Nearly Uncoupled Markov Chains.*

Abstract: The topic of the present paper has been motivated by a recent computational approach to identify chemical conformations and conformational changes within molecular systems. After proper discretization, the conformations show up as almost invariant aggregates in reversible nearly uncoupled Markov chains. Most of the former work on this subject treated the *direct* problem: given the aggregates, analyze the loose coupling in connection with the computation of the stationary distribution (aggregation/disaggregation techniques). In contrast to that the present paper focuses on the *inverse* problem: given the system as a whole, identify the almost invariant aggregates together with the associated transition probabilities. A rather simple and robust algorithm is suggested and illustrated by its application to the n-pentane molecule.

SC 98-04. Christof Schütte; Alexander Fischer; Wilhelm Huisinga; Peter Deuffhard. *A Hybrid Monte Carlo Method for Essential Molecular Dynamics.*

Abstract: Recently, a novel concept for the computation of *essential* features of Hamiltonian systems (such as those arising in molecular dynamics) has been proposed. The realization of that concept was based on subdivision techniques applied to the Frobenius–Perron operator for the dynamical system. The present paper suggests an alternative but related concept based on statistical mechanics, which allows to attack *realistic* molecular systems. In a first step, the frequency of conformational changes is characterized in statistical terms leading to the definition of some Markov operator T that describes the corresponding transition probabilities within the canonical ensemble. In a second step, a discretization of T via hybrid Monte Carlo techniques (based on *short* term subtrajectories only) is shown to lead to a *stochastic* matrix P . With these theoretical preparations, an identification algorithm for conformations is applicable (to be presented elsewhere). Numerical results for the n-pentane molecule are given and interpreted.

- SC 98-05. Thomas Wolf; Andreas Brand; Majid Mohammadzadeh. *Computer algebra algorithms and routines for the computation of conservation laws and fixing of gauge in differential expressions.*

Abstract: Three different approaches for the determination of conservation laws of differential equations are presented. For three corresponding REDUCE computer algebra programs CONLAW1/2/3 the necessary subroutines are described. One of them simplifies general solutions of overdetermined PDE systems so that all remaining free functions and constants correspond to independent conservation laws. It determines redundant functions and constants in differential expressions and is equally useful for the determination of symmetries or the fixing of gauge freedom in differential expressions.

- SC 98-06. Mama Foupouagnigni; André Ronveaux; Wolfram Koepf. *Fourth Order q -Difference Equation for the First Associated of the q -Classical Orthogonal Polynomials.*

(Appeared in: J. Comp. Appl. Math. 101, pp. 231-236 (1999).)

Abstract: We derive the fourth order q -difference equation satisfied by the first associated of the q -classical orthogonal polynomials.

The coefficients of this equation are given in terms of the polynomials σ and τ which appear in the q -Pearson difference equation $D_q(\sigma\rho) = \tau\rho$ defining the weight ρ of the q -classical orthogonal polynomials inside the q -Hahn tableau.

- SC 98-07. Norbert Ascheuer; Martin Grötschel; Nicola Kamin; Jörg Rambau. *Combinatorial Online Optimization in Practice.*

Appeared in: OPTIMA - Mathematical Programming Society Newsletter, Nr. 57, March 1998, pp. 1-6

Abstract: This paper gives a short introduction into combinatorial online optimization. It explains a few evaluation concepts of online algorithms, such as competitiveness, and discusses limitations in their application to

real-world problems. The main focus, however, is a survey of combinatorial online problems coming up in practice, in particular, in large scale material flow and flexible manufacturing systems.

- SC 98-08.** Norbert Ascheuer; Martin Grötschel; Atef Abdel-Aziz Abdel-Hamid. *Order Picking in an Automatic Warehouse: Solving Online Asymmetric TSPs.*

Abstract: We report on a joint project with industry that had the aim to sequence transportation requests within an automatic storage system in such a way that the overall travel time is minimized. The manufacturing environment is such that scheduling decisions have to be made before all jobs are known. We have modeled this task as an *online* Asymmetric Traveling Salesman Problem (ATSP). Several heuristics for the online ATSP are compared computationally within a simulation environment to judge which should be used in practice. Compared to the priority rule used so far, the optimization package reduced the unloaded travel time by about 40 %. Because of these significant savings our procedure was implemented as part of the control software for the stacker cranes of the storage systems.

- SC 98-09.** Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Andreas Löbel. *Optimization of Transportation Systems.*

Abstract: The world has experienced two hundred years of unprecedented advances in vehicle technology, transport system development, and traffic network extension. Technical progress continues but seems to have reached some limits. Congestion, pollution, and increasing costs have created, in some parts of the world, a climate of hostility against transportation technology. Mobility, however, is still increasing. What can be done?

There is no panacea. Interdisciplinary cooperation is necessary, and we are going to argue in this paper that *Mathematics* can contribute significantly to the solution of some of the problems. We propose to employ methods developed in the *Theory of Optimization* to make better use of resources and existing technology. One way of optimization is better planning. We will point out that *Discrete Mathematics* provides a suitable framework for planning decisions within transportation systems. The mathematical approach leads to a better understanding of problems. Precise and quantitative models, and advanced mathematical tools allow for provable and reproducible conclusions. Modern computing equipment is suited to put such methods into practice.

At present, mathematical methods contribute, in particular, to the solution of various problems of *operational planning*. We report about encouraging *results* achieved so far.

- SC 98-10.** Ralf Kornhuber. *Monotone Iterations for Elliptic Variational Inequalities.*

Abstract: A wide range of free boundary problems occurring in enginee-

ring and industry can be rewritten as a minimization problem for a strictly convex, piecewise smooth but non-differentiable energy functional. The fast solution of related discretized problems is a very delicate question, because usual Newton techniques cannot be applied. We propose a new approach based on convex minimization and constrained Newton type linearization. While convex minimization provides global convergence of the overall iteration, the subsequent constrained Newton type linearization is intended to accelerate the convergence speed. We present a general convergence theory and discuss several applications.

SC 98-11. Claus C. Carøe; Rüdiger Schultz. *A Two-Stage Stochastic Program for Unit Commitment Under Uncertainty in a Hydro-Thermal Power System.*

Abstract: We develop a two-stage stochastic programming model with integer first-stage and mixed-integer recourse for solving the unit commitment problem in power generation in the presence of uncertainty of load profiles. The solution methodology rests on a novel scenario decomposition method for stochastic integer programming. This method combines Lagrangian relaxation of non-anticipativity constraints with branch-and-bound. It can be seen as a decomposition algorithm for large-scale mixed-integer linear programs with block-angular structure. With realistic data from a German utility we validate our model and carry out test runs. Sizes of these problems go up to 20.000 integer and 150.000 continuous variables together with up to 180.000 constraints.

SC 98-12. Dimitrios I. Dais; Utz-Uwe Haus; Martin Henk. *On crepant resolutions of 2-parameter series of Gorenstein cyclic quotient singularities.*

Abstract. An immediate generalization of the classical McKay correspondence for Gorenstein quotient spaces \mathbb{C}^r/G in dimensions $r \geq 4$ would primarily demand the existence of projective, crepant, full desingularizations. Since this is not always possible, it is natural to ask about special classes of such quotient spaces which would satisfy the above property. In this paper we give explicit necessary and sufficient conditions under which 2-parameter series of Gorenstein cyclic quotient singularities have torus-equivariant resolutions of this specific sort in all dimensions.

SC 98-13. Andreas Bley; Martin Grötschel; Roland Wessäly. *Design of Broadband Virtual Private Networks: Model and Heuristics for the B-WiN.*

Abstract: We investigate the problem of designing survivable broadband virtual private networks that employ the Open Shortest Path First (OSPF) routing protocol to route the packages. The capacities available for the links of the network are a minimal capacity plus multiples of a unit capacity. Given the directed communication demands between all pairs of nodes, we wish to select the capacities in a such way, that even in case of a single node or a single link failure a specified percentage of each demand

can be satisfied and the costs for these capacities are minimal. We present a mixed-integer linear programming formulation of this problem and several heuristics for its solution. Furthermore, we report on computational results with real-world data.

SC 98-14. Jörg Rambau; Francisco Santos. *The Generalized Baues Problem for Cyclic Polytopes.*

Abstract: The Generalized Baues Problem asks whether for a given point configuration the order complex of all its proper polyhedral subdivisions, partially ordered by refinement, is homotopy equivalent to a sphere. In this paper, an affirmative answer is given for the vertex sets of cyclic polytopes in all dimensions. This yields the first non-trivial class of point configurations with neither a bound on the dimension, the codimension, nor the number of vertices for which this is known to be true. Moreover, it is shown that all triangulations of cyclic polytopes are lifting triangulations. This contrasts the fact that in general there are many non-regular triangulations of cyclic polytopes. Beyond this, we find triangulations of $C(11, 5)$ with flip deficiency. This proves—among other things—that there are triangulations of cyclic polytopes that are non-regular for every choice of points on the moment curve.

SC 98-15. Rainer Roitzsch; Bodo Erdmann; Jens Lang. *The Benefits of Modularization: from KASKADE to KARDOS.*

Abstract: KARDOS solves nonlinear evolution problems in 1, 2, and 3D. An adaptive multilevel finite element algorithm is used to solve the spatial problems arising from linearly implicit discretization methods in time. Local refinement and derefinement techniques are used to handle the development of the mesh over time.

The software engineering techniques used to implement the modules of the KASKADE toolbox are reviewed and their application to the extended problem class is described. A notification system and dynamic construction of records are discussed and their values for the implementation of a mesh transfer operation are shown. The need for low-level and high-level interface elements of a module is discussed for the assembling procedure of KARDOS. At the end we will summarize our experiences.

SC 98-16. Jens Lang. *Adaptive Incompressible Flow Computations with Linearly Implicit Time Discretization and Stabilized Finite Elements.*

Abstract: Fully adaptive solutions of incompressible flow problems employing the discretization sequence first in time then in space are presented. The time discretization is done by linearly implicit one-step methods possibly of high order with automatic step size control. A posteriori error estimates for the stabilized finite element discretization in space are obtained by solving local Dirichlet problems with higher accuracy. Once those estimates have been computed, we are able to control time and space grids

with respect to required tolerances and necessary computational work. The devised method is applied to two benchmark problems in 2D.

SC 98-17. Thomas Holder; Benedict Leimkuhler; Sebastian Reich. *Explicit Variable Step-Size and Time-Reversible Integration*.

Abstract: A variable step-size, semi-explicit variant of the explicit Störmer-Verlet method has been proposed for the time-reversible integration of Newton's equations of motion by Huang & Leimkuhler. Here we propose a fully explicit version of this approach applicable to explicit and symmetric integration methods for general time-reversible differential equations. As applications, we discuss the variable step-size, time-reversible, and fully explicit integration of rigid body motion and reversible Nosé-Hoover dynamics.

SC 98-18. Alexander Martin; Robert Weismantel. *Conjunctive Cuts for Integer Programs*.

Abstract: This paper deals with a family of conjunctive inequalities. Such inequalities are needed to describe the polyhedron associated with all the integer points that satisfy several knapsack constraints simultaneously. Here we demonstrate the strength and potential of conjunctive inequalities in connection with lifting from a computational point of view.

SC 98-19. Sebastian Reich. *Dynamical Systems, Numerical Integration, and Exponentially Small Estimates*.

Abstract: Dynamical systems with two well-separated time-scales are investigated using normal form theory. Exponential estimates for the normal form truncation error are derived and applied to the numerical integration of differential equations (backward error analysis) and the reduction of highly oscillatory Hamiltonian systems (constrained dynamics and correcting potentials). The theoretical results are used to formulate new algorithms for the time integration of conservative Hamiltonian systems (projected multiple time stepping, soft constraints, rigid bodies, symplectic variable step-size methods).

SC 98-20. Andreas Bley. *On the Complexity of Vertex-Disjoint Length-Restricted Path Problems*.

Abstract: Let $G = (V, E)$ be a simple graph and s and t be two distinct vertices of G . A path in G is called ℓ -bounded for some $\ell \in \mathbb{N}$, if it does not contain more than ℓ edges. We study the computational complexity of approximating the optimum value for two optimization problems of finding sets of vertex-disjoint ℓ -bounded s, t -paths in G .

First, we show that computing the maximum number of vertex-disjoint ℓ -bounded s, t -paths is \mathcal{APX} -complete for any fixed length bound $\ell \geq 5$.

Second, for a given number $k \in \mathbb{N}$, $1 \leq k \leq |V| - 1$, and non-negative weights on the edges of G , the problem of finding k vertex-disjoint ℓ -bounded s, t -

paths with minimal total weight is proven to be \mathcal{NPO} -complete for any length bound $\ell \geq 5$. Furthermore, we show that, even if G is complete, it is \mathcal{NP} -complete to approximate the optimal solution value of this problem within a factor of $2^{\langle \phi \rangle^\epsilon}$ for any constant $0 < \epsilon < 1$, where $\langle \phi \rangle$ denotes the encoding size of the given problem instance ϕ .

We prove that these results are tight in the sense that for lengths $\ell \leq 4$ both problems are polynomially solvable, assuming that the weights satisfy a generalized triangle inequality in the weighted problem.

All results presented also hold for directed and non-simple graphs. For the analogous problems where the path length restriction is replaced by the condition that all paths must have length equal to ℓ or where vertex-disjointness is replaced by edge-disjointness we obtain similar results.

SC 98-21. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On a Two-Queue Priority System with Impatience and its Application to a Call Center.*

Abstract: We consider a s -server system with two FCFS queues, where the arrival rates at the queues and the service rate may depend on the number n of customers being in service or in the first queue, but the service rate is assumed to be constant for $n > s$. The customers in the first queue are impatient. If the offered waiting time exceeds a random maximal waiting time I , then the customer leaves the first queue after time I . If I is less than a given deterministic time then he leaves the system else he transits to the end of the second queue. The customers in the first queue have priority. The service of a customer from the second queue will be started if the first queue is empty and more than a given number of servers become idle. For the model being a generalization of the $M(n)/M(n)/s+GI$ system balance conditions for the density of the stationary state process are derived yielding the stability conditions and the probabilities that precisely n customers are in service or in the first queue. For obtaining performance measures for the second queue a system approximation basing on fitting impatience intensities is constructed. The results are applied to the performance analysis of a call center with an integrated voice-mail-server. For an important special case a stochastic decomposition is derived illuminating the connection to the dynamics of the $M(n)/M(n)/s+GI$ system.

SC 98-22. Maria José Lourenço; Samuel Costa S. Rosa; Carlos Alberto Nieto de Castro; C. Albuquerque; Bodo Erdmann; Jens Lang; Rainer Roitzsch. *Simulation of the Transient Heating in an Unsymmetrical Coated Hot-Strip Sensor with a Self-Adaptive Finite Element Method.*

Appeared in: M. S. Kim, S. T. Ro (eds.) Proc. 5th Asian Thermophysical Properties Conference, Seoul, South Korea, 1998, vol. 1, pp. 91-94, Seoul National University

Abstract: The transient heating in an unsymmetrical coated hot-strip sensor was simulated with a self-adaptive finite element method. The first

tests of this model show that it can determine with a small error the thermal conductivity of liquids, from the transient temperature rise in the hot-strip, deposited in a substrate and coated by an alumina spray.

- SC 98-23.** Marc C. Steinbach. *Recursive Direct Algorithms for Multistage Stochastic Programs Financial Engineering*.

Appeared in: P. Kall, H.J. Lüthi (eds.). Operations Research 1998. Sel. Papers of the International Conference on Operations Research, Zürich, 1998, pp. 241-250, Springer, 1999.

Abstract: Multistage stochastic programs can be seen as discrete optimal control problems with a characteristic dynamic structure induced by the scenario tree. To exploit that structure, we propose a highly efficient dynamic programming recursion for the computationally intensive task of KKT systems solution within an interior point method. Test runs on a multistage portfolio selection problem demonstrate the performance of the algorithm.

- SC 98-24.** Norbert Ascheuer; Martin Grötschel; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Combinatorial Online Optimization*.

Abstract: In “classical” optimization, all data of a problem instance are considered given. The standard theory and the usual algorithmic techniques apply to such cases only. Online optimization is different. Many decisions have to be made before all data are available. In addition, decisions once made cannot be changed. How should one act “best” in such an environment?

In this paper we survey online problems coming up in combinatorial optimization. We first outline theoretical concepts, such as competitiveness against various adversaries, to analyze online problems and algorithms. The focus, however, lies on real-world applications. We report, in particular, on theoretical investigations and our practical experience with problems arising in transportation and the automatic handling of material.

- SC 98-25.** Martin Grötschel; Wolfgang Dalitz; Vincent Winczewski. *Math-Net: Ein Informationssystem der Mathematik*.

Zusammenfassung: In diesem Artikel geben wir einen Überblick über das Math-Net-Projekt. Wir berichten über die organisatorischen und technischen Vorgehensweisen beim Aufbau eines verteilten Informationssystems für die Mathematik in Deutschland.

- SC 98-26.** Martin Grötschel; Joachim Lügger. *Scientific Information Systems and Metadata*.

Abstract: This article begins with a short survey on the history of the classification of knowledge. It briefly discusses the traditional means of keeping track of scientific progress, i.e., collecting, classifying, abstracting, and reviewing all publications in a field. The focus of the article, however, is on modern electronic information and communication systems that try to pro-

vide high-quality information by automatic document retrieval or by using metadata, a new tool to guide search engines. We report, in particular, on efforts of this type made jointly by a number of German scientific societies. A full version of this paper including all hypertext references, links to online papers and references to the literature can be found under the URL: <http://elib.zib.de/math.org.softinf.pub>.

SC 98-27. Marc C. Steinbach. *Recursive Direct Optimization and Successive Refinement in Multistage Stochastic Programs.*

Abstract: The paper presents a new algorithmic approach for multistage stochastic programs which are seen as discrete optimal control problems with a characteristic dynamic structure induced by the scenario tree. To exploit that structure, we propose a highly efficient dynamic programming recursion for the computationally intensive task of KKT systems solution within a primal-dual interior point method. Convergence is drastically enhanced by a successive refinement technique providing both primal and dual initial estimates. Test runs on a multistage portfolio selection problem demonstrate the performance of the method.

SC 98-28. Winfried Bruns; Joseph Gubeladze; Martin Henk; Alexander Martin; Robert Weismantel. *A counterexample to an integer analogue of Carathéodory's theorem.*

Abstract: For $n \geq 6$ we provide a counterexample to the conjecture that every integral vector of a n -dimensional integral polyhedral pointed cone C can be written as a nonnegative integral combination of at most n elements of the Hilbert basis of C . In fact, we show that in general at least $\lfloor 7/6 \cdot n \rfloor$ elements of the Hilbert basis are needed.

SC 98-29. Wilhelm Huisinga; Lorenzo Pesce; Ronnie Kosloff; Peter Saalfrank. *Faber and Newton Polynomial Integrators for Open-System Density Matrix Propagation.*

Abstract: Two polynomial expansions of the time-evolution superoperator to directly integrate Markovian Liouville-von Neumann (LvN) equations for quantum open systems, namely the Newton interpolation and the Faber approximation, are presented and critically compared. Details on the numerical implementation including error control, and on the performance of either method are given. In a first physical application, a damped harmonic oscillator is considered. Then, the Faber approximation is applied to compute a condensed phase absorption spectrum, for which a semi-analytical expression is derived. Finally, even more general applications are discussed. In all applications considered here it is found that both the Newton and Faber integrators are fast, general, stable, and accurate.

SC 98-30. Peter Deuffhard; Martin Seebass. *Adaptive Multilevel FEM as Decisive Tools in the Clinical Cancer Therapy Hyperthermia.*

Abstract: The paper surveys recent progress in a joint mathematical-medical project on cancer therapy planning. Within so-called *regional hyperthermia* the computational task is to tune a set of coupled radiofrequency antennas such that a carefully measured tumor is locally heated, but any outside *hot spots* are avoided. A mathematical model of the whole clinical system – air, applicator with antennas, water bolus, individual patient body – involves Maxwell’s equations in inhomogeneous media and a parabolic bioheat transfer equation, which represents a simplified model of heat transfer in the human body (ignoring strong blood vessel heat transport). Both PDEs need to be computed fast and to medical reliability (!) on a workstation within a clinical environment. This requirement triggered a series of new algorithmic developments to be reported here, among which is an adaptive multilevel FEM for Maxwell’s equations, which dominates the numerical simulation time. In total, however, the main bulk of computation time (see Table 3 in Section 4 below) still goes into segmentation – a necessary preprocessing step in the construction a 3D *virtual patient* from the input of a stack of 2D computed tomograms (left out here).

SC 98-31. Thomas Schneider; Nicola Botta; Karl Josef Geratz; Rupert Klein. *Extension of finite volume compressible flow solvers to multi-dimensional, variable density zero Mach number flow.*

Abstract: When attempting to compute unsteady, variable density flows at very small or zero Mach number using a standard finite volume compressible flow solver one faces at least the following difficulties: (i) Spatial pressure variations vanish as the Mach number $M \rightarrow 0$, but they do affect the velocity field at leading order; (ii) the resulting spatial homogeneity of the leading order pressure implies an elliptic divergence constraint for the energy flux; (iii) violation of this constraint would crucially affect the transport of mass, thereby disabling a code to properly advect even a constant density distribution. A previous companion paper derived the above observations from a single time - multiple length scale asymptotic analysis for $M \ll 1$, applied to the conservation form of the governing equations and assuming an ideal gas with constant specific heats. The paper then restricted to weakly compressible one-dimensional flows and introduced a semi-implicit extension of a compressible flow solver, designed to handle the interaction of long wavelength acoustics with small scale, large amplitude density fluctuations. In the present paper we concentrate on the limit of zero Mach number for multi-dimensional, variable density flows. The construction of numerical fluxes for all conserved quantities involves: An explicit upwind step (1) yielding predictions for the nonlinear convective flux components. This procedure still neglects the influence of pressure gradients on the convective fluxes during the time step. Suitable corrections are applied in step (2), which guarantees compliance of the convective

fluxes with the divergence constraint. This step requires the solution of a Poisson-type equation to obtain the relevant pressure gradients. Step (3), which requires the solution of a second Poisson-type equation, yields the yet unknown (non-convective) pressure contribution to the total flux of momentum. The final, cell centered velocity field exactly satisfies a discrete divergence constraint consistent with the asymptotic limit. Notice that step (1) can be done by any standard finite volume compressible flow solver and that the input to steps (2) and (3) involves solely the fluxes from step (1), but is independent on how these were obtained. Thus, we claim that our approach allows any such solver to be extended to simulate incompressible flows. Extensions to the weakly compressible regime $0 < M \ll 1$, reactive flows and more complex equations of state will be addressed in follow-up publications.

SC 98-32. Frank Schmidt. *An Alternative Derivation of the Exact DtN-Map on a Circle.*

Abstract: The paper supplies an alternative derivation of the exact boundary conditions needed for the solution of time-harmonic acoustic scattering problems modeled by the Helmholtz equation. The main idea is to consider the exterior domain problem as an initial value problem with initial data given on the boundary of a disc or sphere. The solution of the exterior domain problem is obtained via Laplace transformation techniques, where the asymptotic Sommerfeld radiation condition is reformulated accordingly.

SC 98-33. Wolfgang Kühn; Manfred Korzen; Olaf Paetsch. *Fast Data Assimilation in Fire Tests of Steel Members.*

Abstract: This report presents a fast data assimilation method to produce an interpolating time and space temperature distribution for steel members subject to fire testing. The method assimilates collected temperature data into the numerical integration of the heat equation. This physically based method also allows the computation of lateral and axial heat flux into and inside the member.

SC 98-34. Norbert Ascheuer; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *The Online Transportation Problem. Competitive Scheduling of Elevators.*

Abstract: In this paper we consider the following online transportation problem (OLTP): Objects are to be transported between the vertices of a given graph. Transportation requests arrive online, specifying the objects to be transported and the corresponding source and target vertex. These requests are to be handled by a server which commences its work at a designated origin vertex and which picks up and drops objects at their starts and destinations. After the end of its service the server returns to its start. The goal of OLTP is to come up with a transportation schedule for the server which finishes as early as possible.

We first show a lower bound of $5/3$ for the competitive ratio of any determi-

nistic algorithm. We then analyze two simple and natural strategies which we call REPLAN and IGNORE. REPLAN completely discards its schedule and recomputes a new one when a new request arrives. IGNORE always runs a (locally optimal) schedule for a set of known requests and ignores all new requests until this schedule is completed.

We show that both strategies, REPLAN and IGNORE, are $5/2$ -competitive. We also present a somewhat less natural strategy SLEEP, which in contrast to the other two strategies may leave the server idle from time to time although unserved requests are known. We also establish a competitive ratio of $5/2$ for the algorithm SLEEP.

Our results are extended to the case of “open schedules” where the server is not required to return to its start position at the end of its service.

SC 98-35. Peter Deuffhard; Martin Weiser; Martin Seebaß. *A New Nonlinear Elliptic Multilevel FEM Applied to Regional Hyperthermia.*

Abstract: In the clinical cancer therapy of regional hyperthermia nonlinear perfusion effects inside and outside the tumor seem to play a not negligible role. A stationary model of such effects leads to a nonlinear Helmholtz term within an elliptic boundary value problem. The present paper reports about the application of a recently designed adaptive multilevel FEM to this problem. For several 3D virtual patients, nonlinear versus linear model is studied. Moreover, the numerical efficiency of the new algorithm is compared with a former application of an adaptive FEM to the corresponding instationary model PDE.

SC 98-36. Wilhelm Huisinga; Christoph Best; Frank Cordes; Rainer Roitzsch; Christof Schütte. *From Simulation Data to Conformational Ensembles: Structure and Dynamics based Methods.*

Abstract: Statistical methods for analyzing large data sets of molecular configurations within the chemical concept of molecular conformations are described. The strategies are based on dependencies between configurations of a molecular ensemble; the article concentrates on dependencies induced by a) correlations between the molecular degrees of freedom, b) geometrical similarities of configurations, and c) dynamical relations between subsets of configurations. The statistical technique realizing aspect a) is based on an approach suggested by AMADEI ET AL. (Proteins, 17 (1993)). It allows to identify essential degrees of freedom of a molecular system and is extended in order to determine single configurations as representatives for the crucial features related to these essential degrees of freedom. Aspects b) and c) are based on statistical cluster methods. They lead to a decomposition of the available simulation data into *conformational ensembles* or *subsets* with the property that all configurations in one of these subsets share a common chemical property. In contrast to the restriction to single representative conformations, conformational ensembles include information about, e.g.,

structural flexibility or dynamical connectivity.

The conceptual similarities and differences of the three approaches are discussed in detail and are illustrated by application to simulation data originating from a hybrid Monte Carlo sampling of a triribonucleotide.

SC 98-37. Peter Nettesheim. *Second Order Transitions in Quantum-Classical Molecular Dynamics*.

Abstract: Mixed quantum–classical models have attracted considerable interest due to the expectation that they correctly describe non–adiabatic processes of full quantum dynamics. One of these models, the so–called QCMD model, represents most degrees of freedom of the molecular system by the means of classical mechanics but an important, small portion of the system is modeled by a wavefunction: the wavefunction is nonlinearly coupled to the classical motion via a singularly perturbed Schrödinger equation.

In extension to the analysis given by F.A. Bornemann [*Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*, Lecture Notes in Mathematics, no. 1687, 1998, Springer, Berlin], the article presents an asymptotic expansion up to second order in the perturbation parameter. This result allows for the construction of new models and numerical integration schemes.

SC 98-38. Christof Schütte; Peter Nettesheim. *Non-Adiabatic Effects in Quantum-Classical Molecular Dynamics*.

Abstract: In molecular dynamics applications there is a growing interest in mixed quantum-classical models. The article is concerned with the so-called QCMD model. This model describes most atoms of the molecular system by the means of classical mechanics but an important, small portion of the system by the means of a wavefunction. We review the conditions under which the QCMD model is known to approximate the full quantum dynamical evolution of the system.

In most quantum-classical simulations the *Born-Oppenheimer model* (BO) is used. In this model, the wavefunction is adiabatically coupled to the classical motion which leads to serious approximation deficiencies with respect to non-adiabatic effects in the fully quantum dynamical description of the system. In contrast to the BO model, the QCMD model does include non-adiabatic processes, e.g., transitions between the energy levels of the quantum system. It is demonstrated that, in mildly non-adiabatic scenarios, so-called *surface hopping* extensions of QCMD simulations yield good approximations of the non-adiabatic effects in full quantum dynamics. The algorithmic strategy of such extensions of QCMD is explained and the crucial steps of its realization are discussed with special emphasis on the numerical problems caused by highly oscillatory phase effects.

SC 98-39. Detlev Stalling; Malte Zoeckler; Oliver Sander; Hans-Christian Hege. *Weighted Labels for 3D Image Segmentation.*

Abstract: Segmentation tools in medical imaging are either based on editing geometric curves or on the assignment of region labels to image voxels. While the first approach is well suited to describe smooth contours at subvoxel accuracy, the second approach is conceptually more simple and guarantees a unique classification of image areas. However, contours extracted from labeled images typically exhibit strong staircase artifacts and are not well suited to represent smooth tissue boundaries. In this paper we describe how this drawback can be circumvented by supplementing region labels with additional weights. We integrated our approach into an interactive segmentation system providing a well-defined set of manual and semi-automatic editing tools. All tools update both region labels as well as the corresponding weights simultaneously, thus allowing one to define segmentation results at high resolution. We applied our techniques to generate 3D polygonal models of anatomical structures.

SC 98-40. Detlev Stalling. *Fast Texture-Based Algorithms for Vector Field Visualization.*

Abstract: In this thesis we develop new methods for visualizing vector fields which specifically address three design goals: accuracy, performance, and cognition. Our methods will be general-purpose and can be applied to arbitrary vector fields in two- and three-dimensional space. The methodology behind our approach is *texture-based visualization*. Texture-based visualization methods imitate techniques known from experimental flow visualization, namely, the observation of randomly dispersed particles or dye injection patterns. Instead of depicting individual lines or symbols, a contiguous high-resolution image or texture is generated. This texture clearly reveals the directional structure of the field. In this way intuitive insight can be obtained and even small details of the field become visible. However, it remains unclear what kind of textures are best suited for our purpose. How do we generate them? Can we apply these methods in three-dimensional space? In particular, we focus on a technique known as *line integral convolution* or LIC. This method turns out to be quite versatile and well-suited for visualizing many interesting vector fields. LIC images display the integral curves or field lines of a vector field at high spatial resolution. Although conceptually quite simple, line integral convolution implies a number of interesting mathematical and algorithmic questions.

SC 98-41. Ralf Borndörfer; Andreas Löbel; Uwe Strubbe; Manfred Völker. *Zielorientierte Dienstplanoptimierung.*

Zusammenfassung: Dieser Artikel behandelt einen Ansatz zur zielorientierten Optimierung der Dienstplanung im ÖPNV. Der Ansatz zielt auf die vollständige Ausnutzung aller planerischen Freiheitsgrade unter korrekter

Berücksichtigung von gesetzlichen, tariflichen, technischen und betrieblichen Rahmenbedingungen. Er basiert auf mathematischen Optimierungstechniken, die wir gegenwärtig in einem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (bmb+f) geförderten Verbundprojekt in einer Kooperation zwischen der HanseCom GmbH, der IVU GmbH und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin entwickeln. Es ist geplant, das Verfahren in die Softwareprodukte HOT II, MICROBUS II und OPUS zu integrieren. Verhandlungen mit den Berliner Verkehrsbetrieben über eine Projektbeteiligung und Integration unserer Software in BERTA sind zur Zeit im Gang. Wir beschreiben die Methodik des Ansatzes, diskutieren Aspekte seiner praktischen Verwendung, und wir berichten über den Stand der Entwicklung.

SC 98-42. Christoph Best; Hans-Christian Hege. *Visualizing conformations in molecular dynamics.*

Abstract: The Monte Carlo simulation of the dynamics of complex molecules produces trajectories with a large number of different configurations to sample configuration space. It is expected that these configurations can be classified into a small number of conformations representing essential changes in the shape of the molecule. We present a method to visualize these conformations by point sets in the plane based on a geometrical distance measure between individual configurations. It turns out that different conformations appear as well-separated point sets. The method is further improved by performing a cluster analysis of the data set. The point-cluster representation is used to control a three-dimensional molecule viewer application to show individual configurations and conformational changes. The extraction of essential coordinates and visualization of molecular shape is discussed.

SC 98-43. Christos A. Athanasiadis; Jörg Rambau; Francisco Santos. *The Generalized Baues Problem for Cyclic Polytopes II.*

Abstract: Given an affine surjection of polytopes $\pi : P \rightarrow Q$, the Generalized Baues Problem asks whether the poset of all proper polyhedral subdivisions of Q which are induced by the map π has the homotopy type of a sphere. We extend earlier work of the last two authors on subdivisions of cyclic polytopes to give an affirmative answer to the problem for the natural surjections between cyclic polytopes $\pi : C(n, d') \rightarrow C(n, d)$ for all $1 \leq d < d' < n$.

SC 98-44. Birkett Huber; Jörg Rambau; Francisco Santos. *The Cayley Trick, lifting subdivisions and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings.*

Abstract: In 1994, Sturmfels gave a polyhedral version of the Cayley Trick of elimination theory: he established an order-preserving bijection between the posets of *coherent* mixed subdivisions of a Minkowski sum $\mathcal{A}_1 + \dots + \mathcal{A}_r$ of point configurations and of *coherent* polyhedral subdivisions of the asso-

ciated Cayley embedding $\mathcal{C}(\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_r)$.

In this paper we extend this correspondence in a natural way to cover also *non-coherent* subdivisions. As an application, we show that the Cayley Trick combined with results of Santos on subdivisions of Lawrence polytopes provides a new independent proof of the Bohne-Dress Theorem on zonotopal tilings. This application uses a combinatorial characterization of lifting subdivisions, also originally proved by Santos.

SC 98-45. Christof Schütte; Alexander Fischer; Wilhelm Huisinga; Peter Deuffhard. *A Direct Approach to Conformational Dynamics based on Hybrid Monte Carlo*.

Abstract: Recently, a novel concept for the computation of *essential* features of the dynamics of Hamiltonian systems (such as molecular dynamics) has been proposed. The realization of this concept had been based on subdivision techniques applied to the Frobenius–Perron operator for the dynamical system. The present paper suggests an alternative but related concept that merges the conceptual advantages of the dynamical systems approach with the appropriate statistical physics framework. This approach allows to define the phrase “conformation” in terms of the dynamical behavior of the molecular system and to characterize the dynamical stability of conformations. In a first step, the frequency of conformational changes is characterized in statistical terms leading to the definition of some Markov operator T that describes the corresponding transition probabilities within the canonical ensemble. In a second step, a discretization of T via specific hybrid Monte Carlo techniques is shown to lead to a *stochastic* matrix P . With these theoretical preparations, an identification algorithm for conformations is applicable. It is demonstrated that the discretization of T can be restricted to few essential degrees of freedom so that the combinatorial explosion of discretization boxes is prevented and biomolecular systems can be attacked. Numerical results for the n-pentane molecule and the triribonucleotide adenylyl(3'-5')cytidylyl(3'-5')cytidin are given and interpreted.

5.2 Technical Reports

TR 98-01. Ralf Borndörfer; Andreas Eisenblätter; Martin Grötschel; Alexander Martin. *The Orientation Model for Frequency Assignment Problems*.

Abstract: Mobile telecommunication systems establish a large number of communication links with a limited number of available frequencies; reuse of the same or adjacent frequencies on neighboring links causes interference. The task to find an assignment of frequencies to channels with minimal interference is the frequency assignment problem. The frequency assignment problem is usually treated as a graph coloring problem where the number

of colors is minimized, but this approach does not model interference minimization correctly.

We give in this paper a new integer programming formulation of the frequency assignment problem, the orientation model, and develop a heuristic two-stage method to solve it. The algorithm iteratively solves an outer and an inner optimization problem. The outer problem decides for each pair of communication links which link gets the higher frequency and leads to an acyclic subdigraph problem with additional longest path restrictions. The inner problem to find an optimal assignment respecting an orientation leads to a min-cost flow problem.

TR 98-02. Wolfgang Kühn. *iTe 1.1 User's Guide*.

Abstract: iTe is an easy to use, interactive authoring tool for LaTeX and TeX documents. With iTe, it is possible to select arbitrary display fragments such as figures, equations, labels, captions, etc. These fragments can then be freely moved, rotated and scaled.

TR 98-03. Monika Kuberek (Red.). *Bibliothekarische Inhalte und Zielsetzungen des KOBV*.

Zusammenfassung: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wurde 1997 auf politische Initiative hin gegründet, um für die ressourcenreiche, aber elektronisch unzulänglich erschlossene Bibliotheksregion Berlin-Brandenburg eine moderne Informationsinfrastruktur zu schaffen. Auf der Basis eines Expertengutachtens wird sowohl in technischer als auch in organisatorischer Hinsicht ein neues Kooperationsmodell entwickelt, das auf den Prinzipien der Dezentralisierung, Deregulierung und Kooperation beruht. Der vorliegende Artikel ist das Ergebnis einer bibliothekarischen Arbeitsgruppe des KOBV, die von Dezember 1997 bis März 1998 das Modell des KOBV unter bibliothekarischen Gesichtspunkten diskutiert hat. Es werden erste Leitlinien festgelegt zu den Serviceleistungen des KOBV, zu den Prinzipien der Zusammenarbeit der Bibliotheken untereinander sowie zur Einbindung des Verbundes in das Bibliothekswesen der Bundesrepublik. Damit dient der Artikel zugleich der Positionsbestimmung des KOBV innerhalb des deutschen Bibliothekswesens.

TR 98-04. Rafał Kędzioriski; Detlef Kehl; Olaf Paetsch. *Client-Server-Anwendung zur Steuerung von Ausgabegeräten*.

Zusammenfassung: Die Steuerung von grafischen Ausgabegeräten erfordert oft mehr als ein oder zwei Optionen, wie man sie vom UNIX *lpr*-Kommando kennt. Hier bietet sich eine grafische Benutzungsschnittstelle zur übersichtlichen Einstellung aller möglichen Parameter und Optionen an. Wenn dieses Gerät zudem nur über eine besondere Treiber-Software zu bedienen ist und in einem heterogenen Intranet zur Verfügung gestellt werden soll, ist eine Steuerung mittels eines WWW-Servers naheliegend. Im

Folgenden sollen Lösungsansätze diskutiert werden, die auf HTML/CGI- bzw. Java-Basis derartige Steuerung realisieren.

Abstract: It is often the case that graphical output devices need more than one or two control options like the UNIX *lpr*-command. A driver programme with a graphical user interface (GUI) can satisfy this requirement. If such a device shall be accessible in an heterogenous network a solution using a WWW-server can be used. Possible HTML/CGI resp. Java-based solutions are discussed in the following.

TR 98-05. Detlev Stalling; Martin Seebaß; Stefan Zachow. *Mehrschichtige Oberflächenmodelle zur computergestuetzten Planung in der Chirurgie.*

Zusammenfassung: Polygonale Schädelmodelle bilden ein wichtiges Hilfsmittel für computergestützte Planungen im Bereich der plastischen Chirurgie. Wir beschreiben, wie derartige Modelle automatisch aus hochauflösten CT-Datensätzen erzeugt werden können. Durch einen lokal steuerbaren Simplifizierungsalgorithmus werden die Modelle so weit vereinfacht, daß auch auf kleineren Graphikcomputern interaktives Arbeiten möglich wird. Die Verwendung eines speziellen Transparenzmodells ermöglicht den ungehinderten Blick auf die bei der Planung relevanten Knochenstrukturen und läßt den Benutzer zugleich die Kopfumrisse des Patienten erkennen.

TR 98-06. Christoph Best. *A simple C++ library for manipulating scientific data sets as structured data.*

Abstract: Representing scientific data sets efficiently on external storage usually involves converting them to a byte string representation using specialized reader/writer routines. The resulting storage files are frequently difficult to interpret without these specialized routines as they do not contain information about the logical structure of the data. Avoiding such problems usually involves heavy-weight data format libraries or data base systems. We present a simple C++ library that allows to create and access data files that store structured data. The structure of the data is described by a data type that can be built from elementary data types (integer and floating-point numbers, byte strings) and composite data types (arrays, structures, unions). An abstract data access class presents the data to the application. Different actual data file structures can be implemented under this layer. This method is particularly suited to applications that require complex data structures, e.g. molecular dynamics simulations. Extensions such as late type binding and object persistence are discussed.

TR 98-07. Ingmar Decker. *A Picture-based Document Retrieval Service for the Electronic Visualization Library.*

Abstract: This report describes the development of an experimental service for picture-based document retrieval for the Electronic Visualization Library (EVlib). The EVlib is a digital library for scientific visualization, established at the Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

(ZIB). The picture-based retrieval service allows users to look for documents by describing the pictures they contain. This query method was developed based on the assumption that (1) pictures often represent relevant parts of the contents of a document, and (2) pictures are often remembered well. A picture-based approach provides a new quality of accessing and exploring scientific literature.

Motivation, concepts and realization of our service are outlined. Results of a user test are presented, too. The results indicate that this service can be used for searching and browsing the document collection in principle. On the other hand, problems were detected which can give fruitful hints for future work concerning document and image retrieval.

5.3 Mitherausgabe von Zeitschriften

Peter Deuflhard

- 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
- 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

Robert Weismantel

- Management Science
- Optima (Book review editor)

5.4 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. D. Alevras, M. Grötschel, R. Wessäly, *Cost-Efficient Network Synthesis from Leased Lines* Annals of Operations Research 76, 1998, 1–20.
2. D. Alevras, M. Grötschel, P. Jonas, U. Paul, R. Wessäly, *Survivable Mobile Phone Architectures: Models and Solution Methods* IEEE Communications Magazine, March 1998, 88–93.
3. U. Ascher, S. Reich, On some difficulties in integrating highly oscillatory Hamiltonian systems. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, **4**, pp. 281–296, 1998.
4. N. Ascheuer, M. Grötschel, N. Kamin und J. Rambau, *Combinatorial online optimization in practice*, OPTIMA **57** (1998), 1–6.
5. N. Ascheuer, M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Combinatorial online optimization*, erscheint in: Proceedings of the International Conference of Operations Research Zürich (OR'98), Springer, 1998.
6. M. Bauer, M. Schreier, U. Nowak, R. Adler, *Beitrag zur mathematischen Modellierung des heterogen-gaskatalytischen Rohrreaktors mit einem Zweiphasenmodell*, Chem. Techn. **50** (1998), 169–176.
7. R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin, *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*, Annals of OR **76** (1998), 73–93. Erhältlich als ZIB Preprint SC 97-35.
8. R. Borndörfer, C.E. Ferreira und A. Martin, *Decomposing Matrices into Blocks*, SIAM J. on Opt. **9** (1998), Nr. 1, 236–269. Erhältlich als ZIB Preprint SC 97-15.
9. R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Alcuin's Transportation Problems and Integer Programming*. In P.L. Butzer, H.Th. Jongen, and W. Oberschelp (Ed'n), *Charlemagne and his Heritage: 1200 Years of Civilization and Science in Europe, Volume II: Mathematical Arts*, Brepols, Turnhout, Belgien, 1998. Erhältlich als ZIB Preprint SC 95-27.
10. R. Borndörfer, M. Grötschel, A. Löbel, *Alcuin's Transportation Problems and Integer Programming* In P. L. Butzer et al. *1200 Years of Arts and Science in Central Europe*, Band II, Thouet Verlag, Aachen, 1998, 379–409.
11. ———, *Optimization of Transportation Systems*. ACTA FORUM ENGELBERG 98, VDF Hochschulverlag an der ETH Zürich, Schweiz, 1998. Erhältlich als ZIB Preprint SC 98-09.
12. R. Borndörfer, M. Grötschel, A. Löbel, *Optimization of Transportation Systems* In ACTA FORUM ENGELBERG 1998, THE FUTURE OF MOBILITY & TRANSPORTATION IN A MOVING WORLD, Ed. VDF Hochschulverlag AG an der ETH Zürich

13. F.A. Bornemann, Ch. Schütte, *A mathematical investigation of the Car-Parrinello Method*, Numer. Math. **78**, pp. 359-376 (1998).
14. A. Brandt und M. Brandt, *On the sojourn times for many-queue head-of-the-line processor-sharing systems with permanent customers*, Math. Meth. Operations Research **47**, Nr. 2 (1998), 181–220.
15. M. Brune, J. Gehring, A. Keller, B. Monien, F. Ramme, A. Reinefeld. *Specifying Resources and Services in Metacomputing Environments*. Parallel Computing Vol. 24, No 12–13 (1998), 1751–1776.
16. M. Brune, J. Gehring, A. Keller, A. Reinefeld. *RSD – Resource and Service Description*. 12th Intl. Symposium on High Performance Computing Systems and Applications, HPCS'98, Edmonton, Alberta, Canada (May 1998), Kluwer Academic Press 1998.
17. R. Bywater, J. Gehring, A. Reinefeld, F. Rippmann, A. Weber. *Metacomputing in Practice: A Distributed Server for Pharmaceutical Industry*. Future Generation Computer Systems, FGCS (1998).
18. W. Dalitz, M. Grötschel, V. Winczewski, *Mathe im Netz — Math-Net: Ein Informationssystem der Mathematik* DFN-Mitteilungen, Heft 48, November 1998, 4–6.
19. I. Decker, P. Müller, D. Limbach, *VisInfo – Fachinformationsdienst Visualisierung*, DFN Mitteilungen (1998), no. 46, 6–7.
20. P. Deuffhard, K. Lipnikov: *Domain decomposition with subdomain CCG for material jump elliptic problems*, East–West J. Numer.Math., **6**, No.2, pp. 81–100 (1998)
21. P. Deuffhard, M. Weiser: *Global Inexact Newton Multilevel FEM for Nonlinear Elliptic Problems*. In: W. Hackbusch, G. Wittum (eds.), *Multigrid Methods, Lecture Notes in Computational Science and Engineering 3*, Springer–Verlag, pp. 71–89 (1998).
22. P. Deuffhard, M. Dellnitz, O. Junge, Ch. Schütte: *Computation of Essential Molecular Dynamics by Subdivision Techniques*. In: P. Deuffhard, J. Hermans, B. Leimkuhler, A.E. Mark, S. Reich, R.D. Skeel (eds.), *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, **4**, Springer–Verlag, pp. 98–115 (1998).
23. P. Deuffhard, H. Engl, O. Scherzer: *A Convergence Analysis of Iterative Methods for the Solution of Nonlinear Ill-posed Problems Under Affinely Invariant Conditions*. Inverse Problems **14**, pp. 1081–1106 (1998).
24. R. Diekmann, G. Gabriel, A. Reinefeld, W. Sack, J. Wiesbaum, J.-M. Wierum. *Shared Memory Parallelization of Dynamic Structural Mechanics Co-*

- des.* HiPer'98 High-Performance Computing on HP Systems, Zürich, 14.–16.10.1998.
25. M. Dreger, N. Fuhr, S. Lohrum and K. Grossjohann *Provider Selection - Design and Implementation of the MeDoc Broker* Lecture Notes in Computer Science 1392, Digital Libraries in Computer Science - The MeDoc Approach, A. Barth, M. Breu, A. Endres, A. Kemp (eds.), Springer 1998, 67-78
 26. M. Dreger, S. Lohrum and P. Müller *The MeDoc Communication Protocol* Lecture Notes in Computer Science 1392, Digital Libraries in Computer Science - The MeDoc Approach, A. Barth, M. Breu, A. Endres, A. Kemp (eds.), Springer 1998, 39-103
 27. M. Dreger, S. Lohrum, H. Schweppe and C.D. Ziegler *Ariadne, an Interactive Navigation and Search System for Computer Science Information on the World-Wide Web* Lecture Notes in Computer Science 1392, Digital Libraries in Computer Science - The MeDoc Approach, A. Barth, M. Breu, A. Endres, A. Kemp (eds.), Springer 1998, 127-147
 28. M. Dreger, S. Göbel and S. Lohrum *Characterizing Bibliographic Databases by Content* Studies in Classification, Data Analysis and Knowledge Organization, Proceedings of the 21th Annual Conference of the Gesellschaft für Klassifikation e.V., University of Potsdam, March 1997 Classification Data Analysis and Data Highways, I. Balderjahn, R. Mathar, M. Schader (eds.), Springer 1998, 355-364
 29. R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard, *Massively Parallel Simulations in Chemical Engineering by Extrapolation Algorithms*, in *Proceedings of the 6th International Workshop on Distributed Data Processing Novosibirsk*, V.G. Khoroshevsky ed., RAS Siberian Branch Publisher, 1998, 1–6.
 30. R. Ehrig, U. Nowak, P. Deuffhard, *Massively Parallel Linearly-Implicit Extrapolation Algorithms as a Powerful Tool in Process Simulation*, in *Parallel Computing: Fundamentals, Applications and New Directions*, E.H. D'Hollander, G.R. Joubert, F.J. Peters, U. Trottenberg eds., 1998, 517–524.
 31. B. Erdmann, J. Lang, M. Seebass, *Optimization of Temperature Distributions for Regional Hyperthermia Based on a Nonlinear Heat Transfer Model*, in *Biotransport: Heat and Mass Transfer in Living Systems*, K. Diller ed., 1998, Annals of the New York Academy of Sciences, **858** (1998), 36–46.
 32. C.E. Ferreira, A. Martin, Cid C. de Souza, R. Weismantel und L.A. Wolsey, *The node capacitated graph partitioning problem: A computational study*, *Mathematical Programming* **81** (1998), 229 – 256.
 33. A. Fischer, F. Cordes, Ch. Schütte, *Hybrid Monte Carlo with Adaptive Temperature in Mixed-Canonical Ensemble: Efficient Conformational Analysis*

- of RNA, J. Comput. Chem. **19**(15), pp. 1689-1697 (1998).
34. M. Fischer, A. Reinefeld. *PVM-SCI: A PVM Implementation for Heterogeneous SCI Clusters*. SCI-Europe'98, Bordeaux, (1998), 159–164.
 35. J. Frauhammer, H. Klein, G. Eigenberger, U. Nowak, *Solving moving boundary problems with an adaptive moving grid method: Rotary heat exchangers with condensation and evaporation*, Chem. Eng. Sci. **53** (1998), 3393–3411.
 36. J. Fröhlich, J. Lang, *Twodimensional Cascadic Finite Element Computations of Combustion Problems*, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. **158** (1998), 255–267.
 37. K. Gatermann, R. Lauterbach, *Automatic classification of normal forms*, Nonlinear Analysis 34, pp. 157–190 (1998).
 38. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Is there a Landau Pole Problem in QED?*, Phys. Rev. Lett. 80 (1998), 4119–4122.
 39. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz und H. Stüben, *Resolution of the Landau pole problem in QED*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 694–696.
 40. 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*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 179–181.
 41. M. Grötschel, W. Dalitz, V. Winczewski *Math-Net: Ein Informationssystem der Mathematik*, DFN Mitteilungen, Heft 48, November 1998
 42. B. Hartel, M. C. Steinbach, H. G. Bock und R. W. Longman, *The influence of friction on time optimal robot trajectories*, Proc. Thirty-fifth Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing (T. Başar und A. Vardy, Hrsg.), 1998, 817–826.
 43. H.-C. Hege, D. Stalling, *Fast LIC with piecewise polynomial filter kernels*, Mathematical Visualization - Algorithms and Applications (H.-C. Hege and K. Polthier, eds.), Springer, 1998, pp. 295–314.
 44. Ch. Helmberg, K.C. Kiwiel und F. Rendl, *Incorporating inequality constraints in the spectral bundle method*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (R. E. Bixby, E. A. Boyd, und R. Z. Ríos-Mercado, Ed.), Lecture Notes in Computer Science, Band 1412, Springer, Juni 1998, 423–435.
 45. Ch. Helmberg und F. Rendl, *Solving quadratic (0,1)-problems by semidefinite programs and cutting planes*, Math. Programming **82** (1998), Nr. 3, 291–315.

46. Ch. Helmberg und R. Weismantel, *Cutting Plane Algorithms for Semidefinite Relaxations*, Topics in Semidefinite and Interior-Point Methods (P. M. Pardalos und H. Wolkowicz, Hsg.), Fields Institute Communications, Band 18, AMS, 1998, 197–213.
47. A. Hofericher, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker und H. Stüben, *Dynamical Wilson fermions and the problem of the chiral limit in compact lattice QED*, Phys. Rev. D58 (1998), 114505.
48. A. Hofericher, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker und H. Stüben, *Effects of dynamical Wilson fermions and the phase structure of Compact QED₄*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 63 (1998), 454–456.
49. S. Hogiu, W. Werncke, M. Pfeiffer, A. Lau, T. Steinke, *Picosecond time-resolved CARS spectroscopy of a mixed excited singlet state of diphenylhexatriene*, Chem. Phys. Lett. 287 (1998) 8-16.
50. A. Keller, A. Reinefeld. *CCS Resource Management in Networked HPC Systems*. Proc. 7th Heterogeneous Computing Workshop HCW'98 at IPPS/SPDP'98, Orlando, Florida, IEEE Computer Society Press, 1998, 44–56.
51. J. Körber, K. Schaber, R. Ehrig, P. Deuffhard, *Modelling and simulation of aerosol formation in absorption processes*, J. Aerosol Sci. **29** (1998), 579–580.
52. T. Koch und A. Martin, *Solving Steiner tree problems in graphs to optimality*, Networks **32** (1998), 207 – 232.
53. S. O. Krumke, M. V. Marathe, H. Noltemeier, R. Ravi und S. S. Ravi, *Approximation algorithms for certain network improvement problems*, Journal of Combinatorial Optimization (1998).
54. ———, *Network improvement problems*, Network Design: Connectivity and Facilities Location (P. M. Pardalos and D. Du, eds.), AMS-DIMACS Volume Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, Bd. 40, American Mathematical Society, 1998, 247–268.
55. S. O. Krumke, M. V. Marathe, H. Noltemeier, S. S. Ravi und H.-C. Wirth, *Upgrading bottleneck constrained forests*, Proceedings of the 24th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Smolenice Castle, Slovak Republic, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1517, Juni 1998, 215–226.
56. S. O. Krumke, M. V. Marathe und S. S. Ravi, *Approximation algorithms for channel assignment in radio networks*, Second International Workshop on Discrete Algorithms and Methods for Mobile Computing and Communications, Dallas, Texas, Oktober 1998.
57. S. O. Krumke, H. Noltemeier, R. Ravi, S. Schwarz und H.-C. Wirth, *Flow improvement and flows with fixed costs*, Proceedings of the International

- Conference of Operations Research Zürich (OR'98), Springer, 1998.
58. S. O. Krumke, H. Noltemeier, S. S. Ravi, M. V. Marathe und K. U. Drangmeister, *Modifying networks to obtain low cost subgraphs*, Theoretical Computer Science **203** (1998), Nr. 1, 91–121.
 59. S. O. Krumke und H.-C. Wirth, *On the minimum label spanning tree problem*, Information Processing Letters **66** (1998), Nr. 2, 81–85.
 60. W. Kühn, *Rigorously computed orbits of dynamical systems without the wrapping effect*, Computing **61** (1998), no. 1, 47–67.
 61. M. Kuberek (Redaktion) *Bibliothekarische Inhalte und Zielsetzungen des KOBV*, Weitblick, 4. Jahrgang 1998, Heft 2, S. 18-34
 62. W. Kühn, Zuzana Kühn, *Cutting high dimensional cakes*, American Mathematical Monthly **105** (1998), no. 2, 168–169.
 63. J. Lang, *Adaptive FEM for Reaction-Diffusion Equations*, Appl. Numer. Math. **26** (1998), 105–116.
 64. J. Lang, *Adaptive Incompressible Flow Computations with Linearly Implicit Time Discretization and Stabilized Finite Elements*, in *Computational Fluid Dynamics '98*, K.D. Papailiou, D. Tsahalis, J. Periaux, C. Hirsch, M. Pandolfi eds., John Wiley & Sons, New York, 1998, 200–204.
 65. J. Lang, W. Merz, *Dynamic mesh design control in semiconductor device simulation*, in: V.B. Bajic (ed.), *Advances in Systems, Signals, Control and Computers*, Vol.II, pp. 82–86, IAAMSAD and SA branch of the Academy of Nonlinear Sciences, Durban, South Africa, 1998.
 66. K. Lipnikov, P. Deuffhard: *Domain Decomposition with Subdomain CCG for Material Jump Elliptic Problems*. In: East–West J. Numer. Math., **6**, No. 2, pp. 81–100 (1998).
 67. Andreas Löbel, *Vehicle scheduling in public transit and Lagrangean pricing*, Management Science **44** (1998), Nr. 12-1, 1637–1649.
 68. M.J. Lourenco, S.C.S. Rosa, C.A. Nieto de Castro, C. Albuquerque, B. Erdmann, J. Lang, R. Roitzsch, *Simulation of the Transient Heating in an Unsymmetrical Coated Hot-Strip Sensor with a Self-Adaptive Finite Element Method*, in *Proceedings of The 5Th Asian Thermophysical Properties Conference*, M.S. Kim and S.T. Ro eds., Seoul National University, Seoul, 1998, 91–94
 69. A. Martin und R. Weismantel, *The intersection of knapsack polyhedra and extensions*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (R.E. Bixby, E.A. Boyd, and R.Z. Ríos-Mercado, Hsg.), Proceedings of the 6th IPCO Conference, 1998, 243 – 256.
 70. M. Mössner-Beigel, M. C. Steinbach, H. G. Bock und R. W. Longman, *Time optimal path planning in polar robots with joint flexibility*, Advances in the

- astronautical sciences (F. R. Hoots, B. Kaufman, P. J. Cefola und D. B. Spencer, Hrsg.), Bd. 97, American Astronautical Society, 1998, 1801–1820.
71. J. Nadobny, D. Sullivan, P. Wust, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix, *A high-resolution interpolation at arbitrary interfaces for the FDTD method*, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **46** (1998), no. 11, 1759–1766.
72. J. Nadobny, W. Wlodarczyk, P. Wust, H. Föhling, G. Mönich, P. Deuffhard, R. Felix, *Design and optimization of short antennas for phased-array hyperthermia applicator*, Proc. PIERS Progress in Electromagnetic Research Symposium 1998, Nantes, 1998, p. 839.
73. J. Nadobny, P. Wust, H. Föhling, D. Stalling, M. Seebass, P. Deuffhard, R. Felix, *Numerical and experimental evaluation of E-field and absorbed power in the pelvic region using a bone-equivalent phantom*, Proc. PIERS Progress in Electromagnetic Research Symposium 1998, Nantes, 1998, p. 264.
74. P. Nettesheim, Ch. Schütte, *Numerical Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*. In: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, **4**, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 396–411 (1998)
75. P. Nettesheim, S. Reich, *Symplectic Multiple-Time-Stepping Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*. In: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, **4**, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 412–420 (1998)
- U. Nowak, R. Ehrig, L. Oeverdieck, *Parallel Extrapolation Methods and Their Application in Chemical Engineering*, in *High-Performance Computing and Networking. Lecture Notes in Computer Science* **1401**, P. Sloot, M. Bubak, B. Hertzberger eds., 1998, 419–428.
76. U. Nowak, S. Gebauer: *A new Test Frame for Ordinary Differential Equation Solvers*. In *ENUMATH 97*, H.G. Bock et. al. eds., World Scientific (1998), 479–486
77. P. Orth, F. Cordes, D. Schnappinger, W. Hillen, W. Saenger, W. Hinrichs, *Tetracycline trapping by Tet repressor and mechanism of induction*, J. Mol. Biol. **279**, pp. 439–447 (1998).
78. K. Rein, M. Zöckler, M. Heisenberg, *A quantitative three-dimensional model of the drosophila optic lobes*, in Press: Current Biology, **9** No. 2 (1999), 93–96.
79. A. Reinefeld, J. Gehring, M. Brune. *Communicating Across Parallel Message-Passing Environments*. Journal of Systems Architecture **44** (1998), Elsevier Publ, 261–272.

80. H. Schirmacher, M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege, *Boundary surface shrinking - a continuous approach to 3D center line extraction*, Proceedings of Image and Multidimensional Signal Processing – IMDSP'98 (B. Girod, H. Niemann, H.-P. Seidel, eds.), IEEE Signal Processing Society, 1998, pp. 25–28.
81. F. Schmidt, *Simulation of Scattering and Reflection Problems via Solution of the 2D Helmholtz Equation*, In: Technical Digest Series, **4**, Integrated Photonics Research, 30.03.–1.04.1998, Victoria, BC, Canada, pp. 408–410 (1998).
82. Ch. Schütte, F.A. Bornemann, *Approximation Properties and Limits of the Quantum-Classical Molecular Dynamics Model*, in: P. Deuffhard, J. Hermans et al., *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.*, **4**, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, pp. 380–395 (1998)
V. H. Schulz, H. G. Bock und M. C. Steinbach, *Exploiting invariants in the numerical solution of multipoint boundary value problems for DAE*, SIAM J. Sci. Comput. **19** (1998), Nr. 2, 440–467.
83. S. Schwarz und S. O. Krumke, *On budget constrained flow improvement*, Information Processing Letters **66** (1998), Nr. 6, 291–297.
84. M. Seebass, D. Stalling, H.-C. Hege, P. Wust, R. Felix, P. Deuffhard, *New features of hyperplan, a hyperthermia planning system*, Proc. Hyperthermia in Clinical Oncology, Venice, 1998, p. 16.
85. D. Stalling, M. Zöckler, H.-C. Hege, *Segmentation of 3D medical images with subvoxel accuracy*, Proceedings Computer Assisted Radiology and Surgery '98 (CAR'98) (H.U. Lemke, K. Inamura, M.W. Vannier, A.G. Farman, eds.), 1998, pp. 137–142.
M. C. Steinbach, H. G. Bock, G. V. Kostin und R. W. Longman, *Mathematical optimization in robotics: Towards automated high speed motion planning*, Surv. Math. Ind. **7** (1998), Nr. 4, 303–340.
86. W. Wlodarczyk, J. Nadobny, H. Föhling, P. Wust, G. Mönich, *Antennenkonzepte und Realisierungsbeispiele für die HF-Hyperthermie*, ITG-Fachbericht 149 Antennen, VDE-Verlag, 1998, München, pp. 335–338.
87. W. Wlodarczyk, J. Nadobny, P. Wust, H. Föhling, A. Salah, G. Mönich, R. Felix, *Numerical studies fo electromagnetic compatibility of phased array hyperthermia applicator and magnetic resonance tomograph*, Proc. PIERS Progress in Electromagnetic Research Symposium 1998, Nantes, 1998, p. 840.
88. W. Wlodarczyk, J. Nadobny, P. Wust, G. Mönich, R. Felix, *Whole body hyperthermia applicator inside MR system: simulations of influence of RF*

- shield of MR scanner on the performance of hyperthermia applicator*, Proc. ISMRM Inter. Soc. Magn. Reson. Med. 6th Scientific Meeting, Sidney, 1998, p. 651.
89. P. Wust, J. Gellermann, J. Beier, S. Wegner, W. Tilly, J. Tröger, D. Stalling, H. Oswald, H.-C. Hege, P. Deuffhard, R. Felix, *Evaluation of segmentation algorithms for generation of patient models in radiofrequency hyperthermia*, Phys. Med. Biol. **43** (1998), 3295–3307.

5.5 Monographien

1. R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998. Shaker Verlag, Aachen, 1998. (ISBN 3-8265-4351-3)
2. P. Deuffhard, J. Hermans, B. Leimkuhler, A. Mark, S. Reich, R.D. Skeel (eds.), *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, **4**, Springer-Verlag (1998). (ISBN 3-540-63242-5)
3. H.-C. Hege, K. Polthier (eds.), *Mathematical Visualization – Algorithms, Applications, and Numerics*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1998, 430 pp., 175 figs., 32 figs. in color. (ISBN 3-540-63991-8)
4. H.-C. Hege, K. Polthier (eds.), *VideoMath-Festival at ICM '98*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1998, VHS-Video, 76 min.; Booklet, 22 pp. (ISBN 3-540-92633-X)
5. H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds.), *Scalable Coherent Interface: Technology and Applications*. Proc. SCI-Europe'98, Bordeaux, 28.–30.9.1998, Ceshire Henbury, 1998, (ISBN 1-901864-02-2)
6. Andreas Löbel, *Optimal vehicle scheduling in public transit*, Dissertation, TU Berlin, 1997. Shaker Verlag, Aachen, 1998. (ISBN 3-8265-3504-9)

5.6 Habilitationen

Freie Universität Berlin

Sebastian Reich (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Dynamical Systems, Numerical Integration, and Exponentially Small Estimates

Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin**Alexander Martin** (Abt. Optimierung)*Integer Programs with Block Structure*

Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.7 Dissertationen**Freie Universität Berlin****Achim Schmidt** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Adaptive Multilevel Langrange–Galerkin Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Tilmann Friese (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Eine Mehrgitter–Methode zur Lösung des Eigenwertproblems der komplexen Helmholtzgleichung*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Detlev Stalling (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Fast Texture-Based Algorithms for Vector Field Visualization*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin**Nicola Kamin** (Abt. Optimierung)*On-Line Optimization of Order Picking in an Automated Warehouse*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Ralf Borndörfer (Abt. Optimierung)*Aspects of Set Packing, Partitioning and Covering*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Regina Urbaniak (Abt. Optimierung)*Decomposition of Generating Sets and of Integer Programs*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.8 Diplomarbeiten**Freie Universität Berlin****Ingmar Decker** (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Dokumentensuche über Bilder – Konzeption und Aufbau eines Image Re-*

trieval Service für die Electronic Visualization Library

Betreuer: Helmut Degen, Ralf-Dirk Hennings (Institut für Publizistik- und Kommunikationswissenschaft, Freie Universität Berlin), Hans-Christian Hege (ZIB)

Susanna Gebauer (Abt. Wissenschaftliche Software)

Implizite Mittelpunktsregel zur Zeitdiskretisierung der Schrödingergleichung

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Hartmut Schirmacher (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Extracting Graphs from Three Dimensional Neuron Data Sets

Betreuer: Thomas Ertl (Institut für Mathematische Maschinen und Datenverarbeitung, Universität Erlangen-Nürnberg), Hans-Christian Hege (ZIB)

Technische Universität Berlin

Stefan Arendt (Abt. Optimierung)

Algorithmen zur Knotenfärbung in Graphen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Stefan Fischer (Abt. Optimierung)

Zweidimensionale Projektionen von Linearen Programmen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Thomas Pröhl (Abt. Optimierung)

Lagrange-Verfahren für Set-Covering-Probleme

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Johannes Schmidt-Ehrenberg (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Visualisierung chemischer Ratenetzwerke, Mai 1998

Betreuer: Erwin Sedlmayr (Fachbereich Physik, TU Berlin), Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

6 Produkte

6.1 A–Max (Version 3.0)

Ansprechpartner: Rudolf Beck

A–Max ist ein adaptives Finite–Elemente–Programm zur Lösung der zeitharmonischen Maxwell–Gleichungen in linearen Medien. Es können beispielsweise passive Bauelemente der Elektrotechnik simuliert und die resultierenden Streuparameter berechnet werden.

Charakteristische Elemente des Programms sind unter anderem:

- Diskretisierung durch Kanten–Elemente auf Tetraedergittern
- A–posteriori–Fehlerschätzer und adaptive Gitterverfeinerung
- Gleichungslöser mit Vorkonditionierung durch Mehrgitterverfahren
- Konvergenzbeschleunigung mittels Helmholtz–Zerlegung der Felder

A–Max ist in der Sprache C++ implementiert.

6.2 moregroebner (version 3.0)

Verfügbar: <http://www.zib.de/gatermann/moregroebner.html>

Ansprechpartner: Karin Gatermann

Maple V.5 Paket zur Berechnung von Gröbner Basen von Idealen und Modulen, Hilbert–Reihen

6.3 symmetry (version 3.0)

Verfügbar: <http://www.zib.de/gatermann/symmetry.html>

Ansprechpartner: Karin Gatermann

Maple V.5 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik

6.4 CodeLib

Verfügbar: <ftp://ftp.zib.de/pub/elib/codelib>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von numerischen Algorithmen,

genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet “Scientific Computing”. Weitere Informationen finden sich auf den Codelib Webseiten¹.

Schwerpunkt der Entwicklungs- und Pflegearbeiten war im Berichtszeitraum die völlige Neuimplementierung und Erweiterung der LIMEX-Software zur Lösung von differentially-algebraischen Systemen mit linear-impliziten Extrapolationstechniken. Es stehen nun effiziente Module zur Berechnung konsistenter Startwerte, zur zeitkontinuierlichen Lösungsdarstellung (“dense output”), zum dynamischen Sparsing und zur iterativen Behandlung der auftretenden linearen Gleichungssysteme zur Verfügung. Um die Nutzung der Verfahren zu vereinfachen, wurden 2 Softwarepakete erstellt. In LIMEX-4.0a werden die linearen Gleichungssysteme mit Hilfe von LAPACK-Modulen im Voll- oder Bandmodus gelöst. LIMEX-4.0b ist auf die Behandlung sehr großer Systeme mit dünnbesetzter Jacobimatrix ausgerichtet. Es kann zwischen direkter und iterativer Lösung der linearen Systeme gewählt werden.

6.5 Amira

Verfügbar: <http://amira.zib.de>

Ansprechpartner: Malte Zoeckler

Die in der Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung entwickelten Visualisierungsverfahren sind in dem modularen, objektorientierten Softwaresystem *Amira* implementiert. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche, kann aber auch per Skript gesteuert werden. Bei der Implementierung wurden moderne Programmier- und Grafikstandards bzw. Defacto-Standards wie z.B. C++, Motif, OpenGL und OpenInventor verwendet. Ein generischer Programmkernel kann dynamisch um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für viele Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren.

Eine Binär- und Entwicklungsversion von *Amira* wird für Anwender aus dem akademischen Bereich unentgeltlich angeboten. Zur Zeit werden die Unix-Derivate IRIX, HP-UX und Linux unterstützt.

6.6 HyperPlan

Ansprechpartner: Detlev Stalling

HyperPlan ist eine Erweiterung des oben beschriebenen Softwaresystems *Amira*. Das System dient dazu, Hyperthermie-Behandlungen in der Krebstherapie am Computer voranzuplanen. *HyperPlan* enthält Komponenten zur Visualisierung,

¹<http://www.zib.de/SciSoft/CodeLib/>

Modellerstellung, Simulation und Optimierung und integriert damit alle notwendigen Werkzeuge zur Erstellung von patientenspezifischen Behandlungsplänen.

Das System wird von der Firma Dr. Sennwald Medizintechnik GmbH (München) kommerziell vertrieben.

6.7 FLIC

Ansprechpartner: Detlev Stalling

Die Linien-Integral-Faltung (LIC) ist ein modernes Verfahren zur Synthese richtungsabhängiger Texturen, das sich z.B. zur Darstellung von Vektorfeldern eignet. Ein besonders schneller, am ZIB entwickelter Algorithmus zum Berechnen von LIC-Bildern wird in Form einer plattform-unabhängigen Software-Bibliothek (FLIC) angeboten. Die Bibliothek enthält zusätzlich leistungsfähige Bildverarbeitungsalgorithmen, mit denen LIC-Bilder auf vielfältige Weise nachbearbeitet und aufgebessert werden können.

6.8 DOC++

Verfügbar: <http://www.zib.de/Visual/software/doc++>

Ansprechpartner: Malte Zoeckler

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. DOC++ ist frei erhältlich.

6.9 iTe

Verfügbar: <http://www.zib.de/Visual/software/ite>

Ansprechpartner: Wolfgang Kühn

iTe ist ein intuitives und einfach zu benutzendes Tool zur Erstellung von \LaTeX - und \TeX -Dokumenten. iTe erlaubt es, beliebige Textfragmente wie Bilder, Gleichungen oder Beschriftungen zu selektieren und dann interaktiv zu verschieben, drehen und zu skalieren. iTe ist in die (X)Emacs-Editoren integriert und auf jedem Unix-System lauffähig.

6.10 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. In 1999 werden die Arbeiten an der Version 3.7 abgeschlossen sein. 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. An vielen Modulen wurden im Bereichszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen.

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. Rebbeck, T. Moulders)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
QSUM	Summation von q-hypergeometrischen Termen (H. Böing, W. Koepf)
RATINT	Rationale Integration (N. Langmead)
RATAPRX	Rationale Approximation (L. Temme, W. Koepf)
REACTEQN	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)

RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)
TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGINT	Trigonometrische Integration (N. Langmead)
TRIGSIMP	Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG	symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)
ZTRANS	Z-Transformation und inverse Z-Transformation (W. Koepf, L. Temme)

Diese Pakete sind entweder Bestandteil des Systems REDUCE oder – falls sie nach der letzten Version entwickelt wurden – über anonymous FTP abrufbar.

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: <i>Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.</i> 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 share library ab Maple Version V.4.
sumtools	W. Koepf: <i>Eine Maple Library für die symbolische Summation.</i> Die Library ist Teil von Maple Version V.4.
hsum.mpl	W. Koepf: <i>Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities.</i>

qsum.mpl H. Böing: *Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation.*

D Maple

Verfügbar: <http://www.zib.de/gatermann>

Ansprechpartner: Karin 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.

6.11 Informationsdienste des eLib-Servers

Verfügbar: <http://elib.zib.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz, Vincent Winczewski

Auf dem vom ZIB betriebenen eLib-Server werden weiterhin verschiedene Informationsdienste im World Wide Web angeboten.

Der IMU-Server beinhaltet die elektronischen Ressourcen der *International Mathematical Union (IMU)*². Durch Kooperation mit der *European Mathematical Society (EMS)* ist es gelungen, diesen Masterserver in 4 Kontinente auf weltweit 34 verteilte Mirrorserver zu spiegeln. Neben den allgemeinen Informationen beinhaltet der IMU-Server auch die neuesten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU, wie der *International Commission of Mathematical Instruction (ICMI)*, der *Commission on Development and Exchange (CDE)* und der *International Commission on the History of Mathematics (ICHM)*.

Der ICM'98-Server (siehe auch Kapitel 3.2.2) informiert weiterhin über den im Jahre 1998 in Berlin veranstalteten *International Congress of Mathematicians*³. Obwohl der Kongreß vorbei ist, soll dieser Server zu Demonstrations- und Dokumentationszwecken weiterhin zugänglich bleiben.

Eine umfangreiche Sammlung von Links (URLs) auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World*⁴ angeboten, die auch zu den Kernbestandteilen des Math-Net⁵ gehören.

Der deutsche Mirror der *Netlib*⁶ erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Nu-

²<http://elib.zib.de/IMU/>

³<http://elib.zib.de/ICM98/>

⁴<http://www.math-net.de/links/>

⁵<http://www.math-net.de/>

⁶<http://elib.zib.de/netlib/>

meriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten und ist auch mit Dublin Core Metadaten erschlossen, so daß damit eine effiziente Suche möglich ist.

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 Überblick⁷.

Die ZIB-Suchmaschine⁸ zum Auffinden lokaler Dokumente, die über den ZIBIS-Server⁹ zugänglich sind, ist ebenfalls mit dem Harvest-System realisiert worden und Teil des eLib-Services.

Das Opt-Net als elektronisches Forum¹⁰ für Optimierer besteht seit 1993. Umfangreiche Arbeiten sind im Berichtszeitraum für die Analyse und Portierung der Software an neuere Rechnerarchitekturen aufgewendet worden.

6.12 KOBV Informationsserver

Verfügbar: <http://www.kobv.de>

Ansprechpartner: Monika Kuberek, Stefan Lohrum

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de> wird das zentrale WWW-Informationsangebot zum Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) angeboten. Dieser Service wird von der KOBV-Projektgruppe am ZIB bereitgestellt.

6.13 WWW–Z39.50 Gateway

Verfügbar: <http://elib.zib.de/z>

Ansprechpartner: Wolfram Schneider, Josef Willenborg

Zur bibliothekarischen Fremddatenübernahme wird ein im ZIB entwickeltes WWW-Z39.50-Gateway insbesondere von den Brandenburger Universitätsbibliotheken Frankfurt/Oder und Cottbus genutzt. Angeboten wird z.Z. die Übernahme von Daten aus der Deutschen Nationalbibliographie der Deutschen Bibliothek sowie den Katalogen des Gemeinsamen Bibliotheksverbundes (GBV) und des Bayerischen Bibliotheksverbundes (BVB). Der Service entstand im Rahmen einer Diplomarbeit von Wolfram Schneider an der TU und am ZIB.

⁷<http://www.math-net.de/search/mibb/>

⁸<http://www.zib.de/suche/>

⁹<http://www.zib.de/>

¹⁰<mailto:opt-net-request@zib.de>; Subject: Help

6.14 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 3.2.4 zu finden.

7 Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Norbert Ascheuer

02.07.1998 *Mathematik und Glückwunschkarten – Optimierung innerbetrieblicher Logistiksysteme*
Gastvortrag Universität Leipzig

Wolfgang Baumann

17.02.1998 *Wissenschaftliche Großprojekte im Rechenzentrum: Ferrari fahren ohne Führerschein?*
URANIA-Führung im ZIB

24.06.1998 *Das Rechenzentrum im ZIB*
Besuch der Herder-Oberschule im ZIB

26.06.1998 *Bemerkungen zum Thema Parallelisierung*
Institut für Kristallzüchtung, Berlin-Adlershof

30.06.1998 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*
Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB

24.09.1998 *Das Rechenzentrum im ZIB*
Schüler-Besuch der Albert–Einstein–Oberschule, Berlin–Neukölln im ZIB

11.11.1998 *Die Supercomputer im ZIB*
Besuch der Klasse 11.1 der Carl–von–Ossietzky–Oberschule, Berlin–Kreuzberg im ZIB

Rudolf Beck

13.03.1998 *Feld- und Temperaturberechnung in der regionalen Hyperthermie.*
Graduiertenkolleg “Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik” des SFB 273 der DFG, Rudolf–Virchow–Klinikum, Berlin

20.05.1998 *Numerik partieller Differentialgleichungen.*
Gastvortrag im Rahmen der Vorlesung “Parallele Algorithmen”, Fachbereich Informatik, Technische Universität Berlin (SS 98)

Christoph Best

28.10.1998 *Wavelets in Critical Phenomena and the Renormalization Group*
Höchstleistungsrechenzentrum Jülich

21.12.1998 *Wavelets in Critical Phenomena and the Renormalization Group*
FB Mathematik MA 7-2, Technische Universität Berlin

Andreas Bley

13.02.1998 *Design of Survivable IP-over ATM Networks*
20. Berliner Algorithmen Tag, Technische Universität Berlin

10.03.1998 *Design of Broadband Virtual Private Networks*
Fourth INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, Florida, USA

19.05.1998 *Optimierung des Breitband-Wissenschaftsnetzes (B-WiN) des DFN Vereins*
Sitzung des Wissenschaftlichen Beirates, ZIB

01.09.1998 *On the complexity of vertex disjoint path problems*
Int. Conf. on Operations Research OR98, Zürich, Schweiz

20.11.1998 *Survivability and the OSPF routing protocol*
DIMACS Workshop on Robust Communication Networks: Interconnection and Survivability Rutgers University, New Jersey, USA

Ralf Borndörfer

02.02.1998 *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*
2nd Aussois Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

16.04.1998 *Relations Among Some Combinatorial Programs*
Combinatorial Optimization 98, Brüssel, Belgien

28.05.1998 *Set Partitioning Methods for Vehicle Routing*
Kolloquiumsvortrag, Universität Leipzig

13.07.1998 *Some Recent Developments in Computational Set Partitioning*
SIAM Annual Meeting 98, Universität Toronto, Kanada

31.08.1998 *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*
Symposium über Operations Research 1998, Zürich, Schweiz

02.11.1998 *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*
Kolloquiumsvortrag, Universität Magdeburg

09.11.1998 *Dienstplanoptimierung im ÖPNV*
1. BMB+F Workshop Diskrete Mathematik, Verkehr und Einsatzplanung, ZIB, Berlin

Manfred Brandt

31.08.1998 *Performance-Analysis of an Inbound Call Center with Integrated Voice-Mail-Server*

Int. Conf. on Operations Research OR98, Zürich, Schweiz

Hubert Busch

- 03.09.1998** *BRAIN - Berlin Research Area Information Network*
Workshop on Distributed High Performance Computing, Institut für Experimentelle Mathematik, Universität Essen
- 01.10.1998** *Statusbericht des ZIB im Themenbereich „Aktuelles aus den Hochleistungsrechenzentren“*
Treffen des AK Supercomputing der Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung (ZKI), ZIB
- 29.10.1998** *Statusbericht über die Nutzung des CRAY T3E am ZIB*
Treffen des AK UNICOS, DWD, Offenbach

Frank Cordes

- 31.03.1998** *Hybrid Monte Carlo with Adaptive Temperature Choice: Efficient Conformational Analysis of RNA*
Europhysics Conference on Computational Physics, Granada, Spain, 2.–5. September 1998

Wolfgang Dalitz

- 27.01.1998** *Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)*
Workshop des 'Math-Bib-Net-Projekts', Universität Göttingen
- 13.02.1998** *Perspektiven des Math-Net*
Global Info Workshop, Universität Göttingen
- 11.03.1998** *Technische und organisatorische Komponenten des Math-Net*
regionaler Math-Net-Workshop Berlin-Brandenburg, ZIB
- 16. – 18.03.1998** *Halbzeit im Math-Net Projekt – eine Zwischenbilanz*
IuK-Workshop '98, Universität Hamburg
- 12.05.1998** *Global Info aus Sicht des Math-Net*
Global Info Workshop, Universität Göttingen
- 13.05.1998** *Math-Net: Ein Informationssystem von und für die Mathematik*
Besuch der Bibliotheksschule Frankfurt am Main, ZIB
- 28.05.1998** *Auf dem Wege in die Informationsgesellschaft: Aktivitäten und Konzepte in den Wissenschaften*
Berliner Arbeitskreis Information (BAK), ZIB
- 04.06.1998** *Die Zukunft des Math-Net*
5. Math-Net-Workshop, Universität München

- 05.06.1998** *Metadaten (Dublin Core) für Software*
5. Math-Net-Workshop, Universität München
- 30.06.1998** *Elektronische Informationsdienste für die Mathematik – der Beitrag des Math-Net-Projekts*
Besuch der FH Potsdam, ZIB
- 06.10.1998** *Math-Net: A Network for Mathematics*
TERENA Networking Conference '98 (TNC '98), TU Dresden
- 04.12.1998** *Math-Net: Der gegenwärtige Stand*
Math-Net-Workshop, Universität Kaiserslautern

Ingmar Decker

- 11.02.1998** *Realisierung eines Zugriffs auf Dokumente über enthaltene Bilder*
6. Treffen des DFN AK Informationsdienste, Johannesstift, Berlin

Peter Deufhard

- 15.01.1998** *Adaptive Discrete Galerkin Methods for Macromolecular Reaction Kinetics*
CWI Colloquium “Modelling, Analysis and Simulation”, Amsterdam, Niederlande
- 23.01.1998** *Essential Molecular Dynamics and Markov Chains*
Department of Chemistry Colloquium, New York University, USA
- 24.01.1998** *Adaptive Multilevel FEM in Clinical Therapy Planning*
Conference on Numerical Analysis and Domain Decomposition, Courant Institute of Mathematical Sciences, NYU, USA
- 22.02.1998** *Essential molecular dynamics—first steps towards a virtual RNA lab*
Seminar on Applied Analysis and Mechanics, University of Oxford, U.K.
- 18.03.1998** *Essential molecular dynamics and Markov chains*
Seminar on Numerical Analysis, Universität Genf, Schweiz
- 19.03.1998** *Hyperthermia Treatment Planning in Clinical Cancer Therapy: Modelling, Simulation and Visualization*
Seminar CAPA/DMA, EPFL, Lausanne, Schweiz
- 27.03.1998** *Optimal cancer therapy planning*
Seminar Departamento de Matematicas, Universidad Autonoma Madrid, Spanien
- 31.03.1998** *Optimal cancer therapy planning*
Vortrag, Seminarios de Analisis Numerico, Universidad Valladolid, Spanien
- 02.04.1998** *Essential molecular dynamics and Markov chains*
Vortrag, Seminarios de Analisis Numerico, Universidad Valladolid, Spanien

- 26.04.1998** *Tagung "Domain Decomposition and Multifield Theories"*
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 29.05.1998** *Laudatio auf Ingrid Daubechies*
Euler-Vorlesung, Sanssouci, Potsdam
- 15.06.1998** *Adaptive Multilevel FEM in der klinischen Krebstherapie*
Seminar Institut für Wissenschaftliches Rechnen, TU Dresden
- 15.07.1998** *Simulation und Identifikation grosser chemischer Reaktionssysteme*
Sommerschule, Graduiertenkolleg "Strukturbildungsprozesse" der Universität Bielefeld, Berlin
- 16.07.1998** *Diskrete Galerkin-Methoden für makromolekulare Prozesse*
Sommerschule, Graduiertenkolleg "Strukturbildungsprozesse" der Universität Bielefeld, Berlin
- 17.07.1998** *Wesentliche Moleküldynamik und Markov-Ketten*
Sommerschule, Graduiertenkolleg "Strukturbildungsprozesse" der Universität Bielefeld, Berlin
- 21.07.1998** *Adaptive Multilevel FEM as Decisive Tools in the Clinical Cancer Therapy Hyperthermia*
Keynote talk, 11th International Conference on Domain Decomposition Methods (DDM 11), Greenwich, U.K.
- 24.09.1998** *Computational Treatment Planning at Virtual Patients for Real Cancer Patients*
Plenary talk, 4th Hellenic European Conference on Computer Mathematics and its Applications (HERCMA'98), Athen, Griechenland
- 06.10.1998** *Multigrid FEMs in Clinical Cancer Therapy Planning*
Vortrag, 10th International GAMM-Workshop on "Multigrid Methods", Universität Bonn
- 14.12.1998** *Optimale Krebstherapie am virtuellen Patienten*
Vortrag, GK "Tumordiagnostik und -therapie unter Einsatz dreidimensionaler radiologischer und lasermedizinischer Verfahren", Universität Heidelberg

Rainald Ehrig

- 17.03.1998** *Advanced Extrapolation Methods for Large Scale Differential Algebraic Problems*
International FORTWIHR Conference 1998, High Performance Scientific and Engineering Computing, München
- 22.04.1998** *Parallel Extrapolation Methods and Their Application in Chemical Engineering*
High-Performance Computing and Networking, Amsterdam

23.06.1998 *Massively Parallel Simulations in Chemical Engineering by Extrapolation Algorithms*

6th International Workshop on Distributed Data Processing, Novosibirsk

20.08.1998 *Recent Advances in Extrapolation Methods for Large Scale Differential Algebraic Problems*

ICM 1998 International Congress of Mathematicians, Berlin

Andreas Eisenblätter

03.02.1998 *Proposal: File Formats for Standard Scenarios for Frequency Planning*

COST 259, Bern, Schweiz

10.03.1998 *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*

Fourth INFORMS Telecommunications Conference Boca Raton, Florida, USA

22.04.1998 *Radio Planning Algorithms for Interference Reduction in Cellular Networks*

Joint COST 252/259 Workshop, Bradford, U.K.

14.05.1998 *Algorithmen zur Planung von Mobilfunknetzen*

Oberseminar Mathematische Optimierung, Leipzig

25.06.1998 *Assigning Frequencies in GSM-Networks*

EMCI 98, Göteborg, Schweden

30.06.1998 *Assigning frequencies in cellular phone networks with FDMA*

INFORMS, Tel Aviv, Israel

23.09.1998 *Combinatorial Lower Bounds for Co-Channel Interference in GSM-Networks*

COST 259, Duisburg

14.12.1998 *Minimizing Interference in GSM-networks*

Workshop on "Optimization Methods for Wireless Networks", Montreal, Kanada

Bodo Erdmann

09.06.1998 *Optimization of Temperature Distributions for Regional Hyperthermia Based on a Nonlinear Heat Transfer Model*

Biotransport '98: International Symposium on Heat and Mass Transfer in Biological and Medical Engineering, Kusadasi, Turkey

20.08.1998 *Mesh Controlling Strategy for Solving Nonlinear Evolution Problems*

ICM 1998 International Congress of Mathematicians, Berlin

09.12.1998 *Mesh Controlling Finite Element Methods for Instationary Nonlinear Problems*

Workshop on Scientific Computing and its Applications, Hongkong, PR China

Hans-Hermann Frese

01.10.1998 *Parallele Bibliotheken*

ZKI AK Supercomputing, ZIB, Berlin

Tilman Friese

20.07.1998 *A Multigrid Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of the Complex Helmholtz Equation.*

11th International Conference on Domain Decomposition Methods (DDM11), Greenwich, UK.

Karin Gatermann

02.04.1998 *Algebraische Rechnungen in äquivarianten dynamischen Systemen*
ETH Zürich, Institut für wissenschaftliches Rechnen

05.04.1998 *Gröbner bases and Invariants*

AMS meeting in Philadelphia, USA

08.04.1998 *Reduction onto orbit space: the geometry of the stratified set*

GAMM Jahrestagung, Bremen

09.08.1998 *Sparse Structural Gröbner Basis Detection*

IMACS–Applications of Computer Algebra, Prag, Tschechien

19.08.1998 *Orbit space reduction*

International Congress of Mathematicians (ICM 98), Berlin

14.09.1998 *Polynomial systems with symmetry*

Workshop “Solving Systems of Equations”, Mathematical Science Research Institute, Berkeley, USA

06.11.1998 *Anwendungen der algorithmischen Invariantentheorie*

Fachbereich Mathematik und Informatik, Gesamthochschule Kassel

01.09.–29.12.1998 *Forschungsaufenthalt: Mathematical Science Research Institute, Berkeley, USA*

Teilnahme am Programm “Symbolic Computation in Geometry and Analysis”

Ralf Götz

29.10.1998 *Statusbericht über den Einsatz eines StorageTek SCSI-Multiplexer*
Treffen des AK UNICOS, DWD, Offenbach

Martin Grötschel

05.02.1998 *Gedanken zur Informationsgesellschaft: Ein neues Lokal-Global-Prinzip?*

Dies Academicus der Universität Ulm

04.03.1998 *Scientific Information Systems and Metadata*

22. Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation: Klassifikation im Informationszeitalter, TU Dresden

11.03.1998 *Aufgaben und Ziele des Math-Net-Projektes*

Regionaler Math-Net-Workshop Berlin-Brandenburg, Berlin

13.03.1998 *Stable Sets and Transportation of Disabled People*

László Lovász' 50th Birthday Conference, Budapest, Ungarn

25.03.1998 *Optimization of Transportation Systems*

Forum Engelberg: The Future of Mobility and Transport in a Moving World, Engelberg, Schweiz

06.05.1998 *Diskrete Mathematik und Telekommunikation*

Universität Wien, Österreich

07.05.1998 *Stabile Mengen in Graphen und Optimierung des Behindertentransportes in Berlin*

Universität Wien, Österreich

08.05.1998 *Discrete Mathematics and Telecommunication*

Technische Universität Graz, Österreich

16.06.1998 *Topologie-, Kapazitäts- und Routenoptimierung im B-WiN*

DFN-Mitgliederversammlung, Berlin

31.08.1998 *Combinatorial Online Optimization*

International Conference on Operations Research (OR'98), Zürich, Schweiz

21.10.1998 *Online Optimization in Practice*

Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica (IASA), Rom, Italien

11.11.1998 *Elektronische Informationssysteme für die Wissenschaften*

Arbeitskreis Wissenschaftliche Information, Universität Osnabrück

13.11.1998 *Electronic Information and Communication: Views of the Future*

1. Workshop des IMU Committee on Electronic Information and Communication, Berlin

24.11.1998 *Kombinatorische Optimierungsprobleme in der Telekommunikation*

Technische Universität München, München

- 27.11.1998** *Überblick über den KOBV*
Humboldt–Universität zu Berlin
- 30.11.1998** *Leben wir bereits in einer Informationsgesellschaft?*
Urania, Berlin
- 01.12.1998** *Scientific Information and Documentation Systems*
Universidad Politécnic de Catalunya, Barcelona, Spanien
- 02.12.1998** *Organizing Large Mathematical Conferences: Pleasure or Nightmare?*
Catalan Mathematical Society Lecture, Barcelona, Spanien
- 10.12.1998** *Matroid Optimization*
2nd CEE Chile School On Optimization, Santiago de Chile, Chile
- 11.12.1998** *Stable Sets, Set Partitioning and Applications*
2nd CEE Chile School On Optimization, Santiago de Chile, Chile
- 11.12.1998** *Nonlinear Approaches to Combinatorial Optimization*
Pontificia Universidad Catolica de Chile, Santiago de Chile, Chile
- 12.12.1998** *Combinatorial Optimization and Telecommunication*
2nd CEE Chile School On Optimization, Santiago de Chile, Chile
- 13.12.1998** *Combinatorial Online Optimization*
2nd CEE Chile School On Optimization, Santiago de Chile, Chile

Hans-Christian Hege

- 29.01.1998** *Modellierung und Visualisierung in der Hyperthermie-Simulation*
Colloquium des Instituts für Computergraphik, Technisch-naturwissenschaftliche Fakultät, Technische Universität Wien, Österreich
- 25.03.1998** *Optimale Therapieplanung am virtuellen Patienten*
Forschungscolloquium der Charité, Medizinische Fakultät der Humboldt–Universität zu Berlin, Virchow-Klinikum (zusammen mit D. Stalling)
- 24.04.1998** *Die 3D-Analyse- und -Visualisierungssoftware Amira*
Workshop „Konfokale Laserscanmikroskopie in Anatomie und Physiologie“, Leibniz-Institut für Neurobiologie, Magdeburg, IfN (zusammen mit M. Zöckler und K. Rein)
- 08.05.1998** *VideoMath-Festival – ein Angebot für Schüler ?*
Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin
- 15.05.1998** *Flug durch die Dimensionen – interaktive Demonstration von Visualisierungsbeispielen aus dem Mikro- und Makrokosmos*
Einweihung des Graphik-Supercomputers am ZIB (zusammen mit M. Zöckler und D. Stalling)

- 25.05.1998** *Enumeration of Symmetry Classes in Mesh Generation and Image Processing*,
Seminar „Hierarchical Methods in Computer Graphics“, Schloß Dagstuhl
- 29.06.1998** *Vom Sehen zum Einsehen – neue Verfahren in der Landschaftsvisualisierung*
Institut für Landschaftsmodellierung, Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung, Müncheberg
- 22.10.1998** *LIC: Interactivity, non-trivial Kernels and Visual Effectiveness*
Visualization '98: Vector Field Visualization Workshop, Department of Computer Science, University of North Carolina at Chapel Hill, USA
- 05. und 06.12.1998** *VideoMath – Mathematische Computeranimationen*
Präsentationen in der WDR-Computernacht (Jubiläumsveranstaltung zur 250. Sendung des WDR-Computerclubs), Heinz-Nixdorf-Museumsforum, Paderborn

Christoph Helmberg

- 03.02.1998** *The Spectral Bundle Method with inequality constraints*
Second Aussois Workshop on Combinatorial Optimization Aussois, Frankreich
- 28.04.1998** *A spectral bundle method for semidefinite programming*
INFORMS Montréal - 1998, Montreal, Kanada
- 19.06.1998** *The Spectral Bundle Method*
Third workshop on High Performance Optimization Techniques, Rotterdam, Niederlande
- 24.06.1998** *Incorporating inequality constraints in the spectral bundle method*
Integer Programming and Combinatorial Optimization '98, Houston, USA
- 26.06.1998** *The Spectral Bundle Method*
Rice University, Houston, USA
- 06.07.1998** *The Spectral Bundle Method with Sign Constraints*
Workshop: Interior-Point Methods, Theory and Applications, Trier
- 16.11.1998** *The spectral bundle method with sign constraints*
Workshop Semidefinite Programming: Applications and Algorithms, ZIB

Wilhelm Huisinga

- 16.06.1998** *Ein numerischer Zugang zur Konformationsanalyse in der Moleküldynamik*
Numerik-Seminar, Halle (Saale)

Dirk Krickel / Wolfgang Maibauer

11.03.1998 *Neustrukturierung des ZIB WWW Servers*
Math-Net Workshop, ZIB, Berlin

Sven Krumke

06.03.1998 *Network Improvement Problems*
Workshop „Network Design Day“, State University of New York at Albany,
USA

19.06.1998 *Upgrading Bottleneck Constrained Forests*
24th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Smolenice Castle, Slovakia

18.09.1998 *Kompetitive Aufzugsteuerung*
Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, TU Graz, Österreich

27.10.1998 *Network Flow Improvement and Newton's Method*
Gastvortrag Technical University of Eindhoven, Niederlande

Monika Kuberek

13.05.1998 *KOBV - ein innovatives Verbundkonzept für die Region*
Besuch der Bibliotheksschule Frankfurt am Main, ZIB

30.06.1998 *Was können Bibliothekare vom KOBV erwarten?*
Besuch einer Seminargruppe der FH Potsdam, ZIB

21.07.1998 *Der KOBV - die Bibliotheksregion Berlin-Brandenburg geht neue Wege*
Besuch einer Studiengruppe aus der Wirtschaftswissenschaftlichen Dokumentation der TU Berlin, ZIB

27.11.1998 *Aktueller Entwicklungsstand des KOBV*
10. Tagung des SISIS-Anwenderforums, Fachhochschule Eberswalde

Wolfgang Kühn

22.09.1998 *Towards an Optimal Control of the Wrapping Effect*
IMACS/GAMM International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Validated Numerics '98, Budapest, Ungarn

Jens Lang

20.01.1998 *Ein adaptives Konzept zur numerischen Lösung von nichtlinearen Evolutionsproblemen in Theorie und Praxis*
Kolloquium, Institut für Numerische Mathematik, TU Dresden

- 03.02.1998** *KARDOS - ein flexibles FE-Simulationsprogramm*
Seminar der TU München, Modellierung und Prozesssimulation in der Halbleitertechnologie, Hirschegg
- 08.09.1998** *Adaptive Incompressible Flow Computations with Linearly Implicit Time Discretization and Stabilized Finite Elements*
ECCOMAS 98, 4th European Computational Fluid Dynamics Conference, Athens, Greece

Thomas Lange

- 17.09.1998** *A Volume Growing Segmentation Approach for 3-dimensional Images*
Workshop SCMED 98, 16.-18. Sep 1998, London, UK

Andreas Löbel

- 09.02.1998** *Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV*
Gruppenseminar der Mathematischen Physik, Technische Universität Berlin
- 11.02.1998** *Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV*
Kolloquium Informatik / Oberseminar, Zentrum für Paralleles Rechnen der Universität zu Köln
- 11.06.1998** *Optimierung im öffentlichen Personennahverkehr*
Kolloquiumsvortrag, Universität Leipzig

Stefan Lohrum

- 23.04.1998** *Anbindung von Fremdsystemen an den KOBV*
9. Tagung des SISIS-Anwenderforums, FH Potsdam
- 21.07.1998** *Die KOBV-Suchmaschine*
Besuch einer Studiengruppe aus der Wirtschaftswissenschaftlichen Dokumentation der TU Berlin, ZIB
- 14./15.09.1998** *KOBV - a cooperative library network for Berlin and Brandenburg*
9. Annual ICAU Meeting, Warschau, Polen

Joachim Lügger

- 11.03.1998** *Metadaten und Klassifikation*
Regionaler Math-Net-Workshop Berlin-Brandenburg, ZIB
- 22.06.1998** *Der Beitrag der Fachgesellschaften zum Aufbau integrierter wissenschaftlicher Informationssysteme aus Sicht der Mathematik*

META-LIB-Workshop, SUB Göttingen

26.10.1998 *Ist die einheitliche Erschließung elektronischer Dokumente im Museumsbereich mit dem Dublin Core möglich?*

Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation, ZIB

03.12.1998 *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg geht in die zweite Runde*

Berliner Arbeitskreis Information, ZIB

Alexander Martin

29.01.1998 *Clustering Problems*

Forschungsinstitut für Diskrete Mathematik, Bonn

02.02.1998 *The Intersection of Knapsacks*

Workshop "Combinatorial Optimization", Aussois, Frankreich

20.02.1998 *Decomposing Matrices into Blocks*

Max-Planck-Institut, Saarbrücken

21.04.1998 *Multicommodity Flow Problems*

EPFL, Lausanne, Schweiz

25.04.1998 *The Intersection of Knapsack Polytopes*

Symposium über Diskrete Mathematik 1998, Berlin

23.06.1998 *The Intersection of Knapsack Polytopes and Extensions*

Tagung "6th International IPCO Conference", Houston, USA

28.09.1998 *The Intersection of Knapsack Polytopes*

Workshop "Discrete Optimization", Bonn

07.12.1998 *Ganzzahlige Programme mit Blockstruktur*

Technische Universität Berlin

10.12.1998 *Ganzzahlige Programme mit Blockstruktur*

Universität Freiburg

Peter Müller

11.02.1998 *Realisierung eines vollautomatischen Publikationsservers*

6. Treffen des DFN AK Informationsdienste, Johannesstift, Berlin

Jacek Nadobny

23.04.1998 *Antennenkonzepte und Realisierungsbeispiele für die HF-Hyperthermie*

ITG-Fachtagung Antennen, 21. bis 24. April 1998 München

08.05.1998 *Modellierung und Optimierung von Antennen*

Vortrag im Rahmen des Graduiertenkollegs 331 "Temperaturabhängige Effekte für Therapie und Diagnostik", Campus Virchow Klinikum, Humboldt Universität zu Berlin

14.07.1998 *Numerical and experimental evaluation of E-field and absorbed power in the pelvic region using a bone-equivalent phantom*

PIERS98 Progress in Electromagnetic Research Symposium 13-17 July 1998, Nantes, France

16.07.1998 *Design and optimization of short antennas for phased-array hyperthermia applicator*

PIERS98 Progress in Electromagnetic Research Symposium 13-17 July 1998, Nantes, France

16.07.1998 *Numerical studies for electromagnetic compatibility of phased array hyperthermia applicator and magnetic resonance tomograph*

PIERS98 Progress in Electromagnetic Research Symposium 13-17 July 1998, Nantes, France

Peter Nettesheim**31.03.1998** *Quantum-Classical Molecular Dynamics: Construction of Numerical Integrators*

Workshop on Adaptive Methods for Differential Equations, 30.03–01.04.1998, Royal Institute of Technology, Stockholm, Schweden ,

06.06.1998 *Numerical Integrators for Quantum-Classical Molecular Dynamics*

19. Norddeutsches Kolloquium über Angewandte Analysis und Numerik, 05.–06.06.1998, TU Hamburg–Harburg

22.06.1998 *Die Grenzen quanten-klassischer Modelle, Verbesserungsvorschläge und Algorithmen*

Seminar "Moleküle im Rechner — Seminar zur Methodik von Simulation und Visualisierung", ZIB und FU Berlin

Winfried Neun**22.04.1998** *The Realization of an OpenMath Server for REDUCE*

(with M. Gaetano and C. Huchet), Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing (CASC '98), Euler-Institut, St. Petersburg, Rußland

Ulrich Nowak**19.01.1998** *Selfadaptive Numerical Methods for Systems of PDEs*

Workshop on Extended Thermodynamics and Hyperbolic Systems, Institut für Verfahrenstechnik, TU Berlin

12.02.1998 *Extrapolationsmethoden für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen*

Institut für Verfahrenstechnik, TU Hamburg-Harburg

17.02.1998 *Numerisch Simulieren? Kinderleicht?!*

Anlässlich der URANIA-Führung am ZIB

15.08.1998 *Extrapolation Methods for ODEs and PDEs and Their Parallelization*

Invited talk, 7th Intern. Colloquium on Numerical Analysis and Computer Science with Applications. Plovdiv, Bulgaria

Olaf Paetsch

04.06.1998 *ZIB-Vorstellung und Amira-Demonstration*

Arbeitskreistreffen Multimedia und Grafik des ZKI und der WRAKG 1998, 4.-5. Juni. 1998, Berlin

Wolfgang Pyszkalski

06.10.1998 *Das Konrad-Zuse-Zentrum und seine informationstechnische Infrastruktur*

Eröffnungsvortrag des SunDay am Konrad-Zuse-Zentrum

Jörg Rambau

26.01.1998 *Cell Structures in Simplicial Complexes*

Kolloquium des Graduiertenkollegs „Algorithmische Diskrete Mathematik“, Berlin

25.04.1998 *A New View on the Cayley Trick*

Symposium „Diskrete Mathematik“, Berlin

19.08.1998 *A New View on the Cayley Trick*

International Congress of Mathematicians, Berlin

29.08.1998 *A New View on the Cayley Trick*

Geometric Combinatorics, Kotor, Jugoslawien

05.11.1998 *Online-Steuerung von Aufzugsystemen*

Berichtskolloquium „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, Rolduc, Niederlande

Sebastian Reich

14.04.1998 *Classical Mechanics and Symplectic Integration*

Kolloquiumsvortrag, Fachbereich Mathematik, Universität Magdeburg

22.04.1998 *Multiple-Time-Scales, Adiabatic Invariants, and Numerical Integration*

Kolloquiumsvortrag, Institut für Didaktik in der Mathematik, ETH Zürich, Schweiz

30.04.1998 *Geometric Integration Methods*

Kolloquiumsvortrag, Department of Mathematics, Technical University Budapest (BME), Ungarn

16.06.1998 *Multiple-Time-Scales in Molecular Dynamics*

Kolloquiumsvortrag, Fachbereich Mathematik, Universität Bremen

Alexander Reinefeld

23.03.1998 *Werkzeuge zur effizienten, kooperativen Nutzung vernetzter Höchstleistungsrechner*

Informatik Kolloquium Technische Universität Dresden

02.06.1998 *Parallel Bio-Informatics Applications at PC"*

Universität Bielefeld

22.06.1998 *Höchstleistungsrechnen mit Scalable Coherent Interface*

Tutorium „Cluster Computing“, Supercomputer '98, Mannheim

04.08.1998 *Building Blocks for Metacomputing Environments*

Globus Retreat, Chicago, USA

05.11.1998 *Meta-Computing: Verteiltes Höchstleistungsrechnen in Industrie und Wissenschaft*

Tag der Informatik in Adlershof, Humboldt-Universität zu Berlin

01.12.1998 *Middleware für das Management verteilter Ressourcen*

CS-Kolloquium, Humboldt-Universität zu Berlin

Rainer Roitzsch

23.01.1998 *The Benefits of Modularization: from KASKADE to KARDOS*

14th GAMM-Seminar on 'Concepts of Numerical Software', Kiel

Hartmut Schirmacher

13.07.1998 *Boundary Surface Shrinking - a Continuous Approach to 3D Center Line Extraction* (Postervortrag)

IEEE Image and Multidimensional Signal Processing, Alpbach

Frank Schmidt

01.04.1998 *Simulation of Scattering and Reflection Problems via Solution of the 2D Helmholtz Equation.*

Integrated Photonics Research, Victoria, BC, Canada

07.05.1998 *Numerische Berechnung von Eigenlösungen der komplexen Helmholtzgleichung.*

Seminar für Höchstfrequenztechnik, Universität Karlsruhe

19.05.1998 *Diskrete transparente Randbedingungen für optische Streuprobleme.*
Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats, ZIB

18.09.1998 *Computation of Waveguide Modes Using Edge Elements.*

Workshop “Optical Waveguide Theory and Modelling”, FernUniversität Hagen

30.09.1998 *Transparent Boundary Conditions for the Numerical Solution of Scattering Problems in Integrated Optics.*

Workshop “Scientific Computing in Electrical Engineering”, WIAS Berlin

26.11.1998 *Diskrete transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung.*

Arbeitsgemeinschaft Numerik, Universität Tübingen

30.11.1998 *Diskrete transparente Randbedingungen für die Schrödingergleichung.*

Seminar “Moleküle im Rechner — Seminar zur Methodik von Simulation und Visualisierung”, ZIB

Johannes Schmidt-Ehrenberg

29.05.1998 *Visualisierung und Analyse chemischer Ratenetzwerke*

Institut für Astronomie und Astrophysik, Technische Universität Berlin

Beate Schröder

30.06.1998 *Multimedia in der Museumsdokumentation am Beispiel einer Datenbank des Deutschen Historischen Museums in Berlin*

Besuch einer Gruppe von Studenten der FH-Potsdam in Begleitung von Frau Prof. Dr. Eleonore Poetzsch (Fachbereich Archiv- Bibliothek- Dokumentation der FHP), ZIB

21.07.1998 *Nutzung der Neuen Medien – die Datenbank des Deutschen Historischen Museums in Berlin*

Besuch einer Studiengruppe der Fortbildungsmaßnahme „Wissenschaftliche Dokumentation“ der TU Berlin in Begleitung von Herrn Dr. Marfels, ZIB

Christof Schütte

22.02.1998 *Essentielle Moleküldynamik mittels Hybrid Monte-Carlo: Theorie und numerische Experimente*

Universität Bayreuth

- 25.02.1998** *Essentielle Moleküldynamik mittels Hybrid Monte-Carlo: Theorie und numerische Experimente*
Universität Tübingen
- 06.04.1998** *Modelling Nonadiabatic Effects in Quantum-Classical Molecular Dynamics*
J. Heyrovski Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences, Prag, Tschechien
- 06.11.1998** *Hybride und fast-entkoppelte Markov-Ketten zur numerischen Beschreibung biomolekularer Konformationen*
Universität Düsseldorf
- 11.11.1998** *Markov-Ketten und Konformationsdynamik*
Technische Universität München
- 19.11.1998** *Maßgeschneiderte Markov-Ketten zur numerischen Beschreibung biomolekularer Konformationen*
Universität Paderborn
- 14.12.1998** *Identifikation und Dynamik biomolekularer Konformationen*
Freie Universität Berlin

Martin Seebaß

- 17.02.1998** *Patientenmodelle für die Hyperthermie-Planung*
Urania-Führung, ZIB, Berlin
- 16.05.1998** *New Features of HyperPlan, a Hyperthermia Planning System*
Hyperthermia in Clinical Oncology, 28.-30. Mai 1998, Venedig, Italien
- 11.06.1998** *Einsatz der Telemedizin in der Therapieplanung für die Hyperthermie*
12. Treffpunkt Medizintechnik, 11. Juni 1998, ZIB, Berlin
- 24.06.1998** *Patienten im Computer, Patienten in der Klinik – Beitrag zu einem Spannungsfeld*
Besuch Herder-Oberschule, ZIB, Berlin
- 17.09.1998** *Generation of Tetrahedral Patient Models for Treatment Planning*
Workshop SCMED 98, 16.-18. Sep 1998, London, UK

Detlev Stalling

- 25.03.1998** *Optimale Therapieplanung am virtuellen Patienten*
Forschungscolloquium der Charité, Medizinische Fakultät der Humboldt-Universität zu Berlin, Virchow-Klinikum (zusammen mit H.-C. Hege)
- 15.05.1998** *Flug durch die Dimensionen – interaktive Demonstration von Visualisierungsbeispielen aus dem Mikro- und Makrokosmos*
Einweihung des Graphik-Supercomputers am ZIB (zusammen mit H.-C.

Hege und M. Zöckler)

- 25.06.1998** *Segmentation of 3D Medical Images with Subvoxel Accuracy*
12th International Symposium on Computer Assisted Radiology and Surgery, 24.-27. Juni 1998, Tokio, Japan
- 17.09.1998** *Generation of 3D-Patient Models Using the Generalized Marching Cubes Method*
Workshop SCMED 98, 16.-18. Sep 1998, London, UK
- 04.12.1998** *Simplifizierung triangulierter Flächen*
Disputationsvortrag, Fachbereich Mathematik und Informatik, FU Berlin

Marc Steinbach

- 25.03.1998** *Schnelle Bahnoptimierung mittels inverser Dynamik*
DFG-Workshop „Echtzeit-Optimierung von Robotern“, UniBw München
- 07.05.1998** *Recent algorithmic developments in trajectory optimization*
Fourth SIAM Conference on Control and its Applications, Jacksonville, USA
- 18.06.1998** *Matrizen und Bäume im Portfoliomanagement*
Universität Leipzig
- 06.08.1998** *Recursive Optimization on Trees*
Carnegie Mellon University, USA
- 11.08.1998** *Recursive Direct Optimization in Financial Multistage Stochastic Programs*
VII International Conference on Stochastic Programming, Vancouver, Kanada
- 01.09.1998** *Recursive Direct Algorithms for Multistage Stochastic Programs in Financial Engineering*
International Conference on Operations Research, Zürich, Schweiz

Thomas Steinke

- 16.01.1998** *DGauss on Parallel Systems: Prospects at ZIB*
Oxford Molecular Ltd., Oxford, U.K.
- 16.02.1998** *Nichtempirische Molekülberechnungen auf CRAY T3E (Poster)*
Höchstleistungsrechnen in der Chemie, 16.-18.02.1998, Forschungszentrum Jülich
- 22.08.1998** *UniChem and DGauss at ZIB: Current Issues*
Quantum Chemistry Steering Committee Meeting, Oxford Molecular, Boston, USA

Manfred Stolle

- 05.03.1998** *Beeing Poor With Dignity / How to Deal With Slim Resources on a DMF Server*
15. Treffen des Arbeitskreises UNICOS, Berlin
- 18.06.1998** *Serving a Demanding Client While Short on Resources*
Cray User Group Conference, Stuttgart
- 07.07.1998** *Massenspeicher im ZIB*
ZIB, Berlin
- 05.11.1998** *UNIX-Grundkurs*
ZEDAT, Freie Universität Berlin

Robert Weismantel

- 05.02.1998** *Primal algorithms*
Workshop "Combinatorial Optimization", Aussois, Frankreich
- 09.03.1998** *Duale Methoden in der Ganzzahligen Optimierung*
Kolloquium Universität Trier
- 16.04.1998** *Test sets and the knapsack problem*
"Combinatorial Optimization 1998", Brüssel, Belgien
- 20.04.1998** *From augmentation to test sets*
Kolloquium Universität Utrecht, Niederlande

Roland Wessály

- 17.02.1998** *Kostenoptimale Planung von Telekommunikationsnetzwerken unter Aspekten der Ausfallsicherheit.*
URANIA – Führung im ZIB, Berlin
- 11.03.1998** *Diversified Path Routing in Survivable Network Design*
Fourth INFORMS Telecommunications Conference Boca Raton, Florida, USA
- 26.08.1998** *New inequalities for a capacitated survivable network design problem*
International Congress of Mathematicians (ICM), Berlin
- 17.11.1998** *Dimensioning survivable capacitated networks – Models and algorithms for a German provider*
Lucent Technologies (Bell Labs) Murray Hill, New Jersey, USA
- 20.11.1998** *Different restoration models for survivable network design*
DIMACS Workshop on Robust Communication Networks: Interconnection and Survivability Rutgers University, New Jersey, USA

Josef Willenborg**13.05.1998** *Die KOBV-Suchmaschine*

Besuch der Bibliotheksschule Frankfurt am Main, ZIB

Vincent Winczewski**27.01.1998** *Harvest-Installation und -Anpassung*

Workshop des 'Math-Bib-Net-Projekts', Universität Göttingen

17.02.1998 *Informationendienste für die Mathematik im Internet*

Urania-Führung, Berlin

11.03.1998 *Harvesting mathematischer Information: lokal und regional*

regionaler Math-Net-Workshop Berlin-Brandenburg, ZIB

14.02.1998 *Harvest-Installation und -Anpassung*

Math-Net Workshop, Universität Göttingen

04.06.1998 *Zentrale Anteile des Math-Net*

5. Math-Net-Workshop, Universität München

24.06.1998 *Informationssysteme im Internet*

Schülergruppe der Herder-Oberschule, Berlin

11.11.1998 *Informationssysteme im Internet*

Gewinner des Wettbewerbs "Kunst und Mathematik", Berlin

03.12.1998 *Komponenten des Math-Net: Navigator und Suchmaschine*

Math-Net Workshop, Kaiserslautern

Malte Zöckler**24.04.1998** *Die 3D-Analyse- und -Visualisierungssoftware Amira*

Workshop „Konfokale Laserscanmikroskopie in Anatomie und Physiologie“, Leibniz-Institut für Neurobiologie, Magdeburg, IfN (zusammen mit H.-C. Hege und K. Rein)

06.05.1998 *Ein virtuelles Neuro-Anatomie-Labor*BMBF-Status-Seminar *Virtual Brain*, ZIB, (zusammen mit K. Rein)**15.05.1998** *Flug durch die Dimensionen – interaktive Demonstration von Visualisierungsbeispielen aus dem Mikro- und Makrokosmos*

Einweihung des Graphik-Supercomputers am ZIB (zusammen mit H.-C. Hege und D. Stalling)

7.2 Vorlesungen und Seminare

Wolfgang Baumann: Technische Universität Berlin

WS 97/98 *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, mit F. Thiele)

Peter Deuffhard: Freie Universität Berlin

SS 98 *Virtual Science* (Seminar, Mitveranstalter: R. Kornhuber, Ch. Schütte, M. Zöckler)

SS 98 *Scientific Computing* (Seminar, Mitveranstalter: Ch. Schütte)

SS 98 *Nichtlineare Dynamik* (Oberseminar, Mitveranstalter: B. Fiedler (FU Berlin), K. Schneider (WIAS))

WS 98/99 *Numerik partieller Differentialgleichungen* (Vorlesung)

WS 98/99 *Numerische Mathematik/Scientific Computing* (Oberseminar, Mitveranstalter: B. Fiedler (FUB), H. Gajewski (FUB/WIAS), A. Klar (FUB), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), R. März, J. Sprekels (WIAS))

Rainald Ehrig: Freie Universität Berlin

SS 98 *Grundlagen der Parallelverarbeitung* (Vorlesung, Mitveranstalter: M. Dahm, S. Fehr, U. Nowak)

Karin Gatermann: Freie Universität Berlin

WS 97/98 *Algorithmische Algebraische Geometrie und ihre Anwendungen* (Vorlesung)

SS 98 *Algebraische Algorithmen* (Vorlesung)

WS 98/99 *Gleichgewichte und Dynamik chemischer Reaktionen* (Seminar)

Martin Grötschel: Technische Universität Berlin

WS 97/98 *Kombinatorische Optimierung* (Vorlesung)

WS 97/98 *Innere-Punkte-Methoden* (Seminar)

SS 98 *Anwendungen der ganzzahligen Optimierung* (Vorlesung)

SS 98 *Kombinatorische Optimierung in der Telekommunikation* (Seminar)

Christoph Helmberg: Technische Universität Berlin

WS 97/98 *Lineare Programmierung* (Seminar)

Jens Lang: Freie Universität Berlin

SS 97/98 *Numerik Partieller Differentialgleichungen: Funktionalanalytische Grundlagen* (Vorlesung)

Alexander Martin: Universität Trier

WS 97/98 *Operations Research II* (Vorlesung/Übung)

WS 97/98 *Relaxierungen Kombinatorischer Optimierungsprobleme* (Seminar)

Ulrich Nowak: Freie Universität Berlin

SS 98 *Grundlagen der Parallelverarbeitung* (Vorlesung, Mitveranstalter: M. Dahm, R. Ehrig, S. Fehr)

Christof Schütte: Freie Universität Berlin

SS 98 *Virtual Science* (Seminar, Mitveranstalter: P. Deuffhard, R. Kornhuber, M. Zöckler)

WS 98/99 *Moleküle im Rechner — Seminar zur Methodik von Simulation und Visualisierung* (Seminar, Mitveranstalter: Burkhard Schmidt (FB Chemie der FU))

Robert Weismantel: Universität Magdeburg

WS 97/98 *Ganzzahlige Optimierung* (Vorlesung/Übung)

WS 97/98 *Relaxierungen eines ganzzahligen Programms* (Seminar)

Malte Zöckler: Freie Universität Berlin

SS 98 *Virtual Science* (Seminar, Mitveranstalter: P. Deuffhard, R. Kornhuber, Ch. Schütte)

8 Tagungen und Gäste des ZIB

8.1 Gastvorträge am ZIB

- 05.01.1998** Steffen Kirchner M.A. (Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Sudanarchäologie und Ägyptologie):
Der Löwentempel von Masuwwarat es Sufra - ein rekonstruierter Tempel in der Virtuellen Realität
- 06.02.1998** Prof. Dr. M. Eduard Gröller (Institut für Computergrafik, Technische Universität Wien, Österreich):
Visualisierung des Verhaltens höherdimensionaler dynamischer Systeme
- 10.02.1998** Noud Gademann (University of Twente, Niederlande):
Combinatorial Optimization in Mechanical Engineering
- 09.03.1998** Priv. Doz. Dr. Bettina Schnor (Institut für Telematik, Medizinische Universität Lübeck):
Scheduling- und Migrationsstrategien für parallele Anwendungen in verteilten Systemen
- 09.03.1998** Dr. Alexander Reinefeld (damals: PC², Universität Paderborn, seit Oktober 1998 Leiter des Bereichs Computer Science des ZIB):
Werkzeuge zur effizienten, kooperativen Nutzung vernetzter Höchstleistungsrechner
- 09.03.1998** Dr. Wolfgang Emmerich (University College London, U.K.):
Architekturen von Software-Entwicklungsumgebungen mit OMG/CORBA und ODBMSs
- 09.03.1998** Prof. Dr. Thomas Ludwig (TU München):
Methoden zur Realisierung interoperabler Werkzeuge zur parallelen Programmierung
- 10.03.1998** Dr. Armin Iske (CoCreate Software GmbH, Sindelfingen):
Hierarchische Interpolation mit Radialen Basisfunktionen
- 10.03.1998** Krzysztof C. Kiwiel (Systems Research Institute, Polish Academy of Sciences, Polen):
The Efficiency of Ballstep Subgradient Level Methods for Convex Optimization
- 16.03.1998** Prof. Dr. Peter Richter (Universität Bremen, Fachbereich Physik, Institut für Theoretische Physik):
Dynamik des Kovalevskaya-Kreisels
- 23.03.1998** Prof. Dr. Harry Yserentant (Mathematisches Institut, Universität Tübingen):
Ein Teilchenmodell kompressibler Flüssigkeiten und Gase

- 05.05.1998** Dr. Erwin Keeve (Harvard Medical School, USA):
Deformable Modeling for Surgical Simulation
- 07.05.1998** Dr. Jan Verwer (CWI, Amsterdam, Niederlande):
A Second Order Rosenbrock Method to Photochemical Dispersion Problems
- 18.05.1998** Prof. Dr. Peter Schuster (Universität Wien, Österreich):
Evolution in Molekularer Auflösung
- 16.06.1998** Dr. Ralf Gruber (EPFL, Lausanne, Schweiz):
The Commpdoty Parallel Computer Project Swiss-TX
- 06.07.1998** Dr. Oliver Deussen (Universität Magdeburg, Fakultät für Informatik, Institut für Simulation und Graphik):
Computergenerierte Pflanzen und Ökosysteme (Zusammen mit Bernd Lintermann, Zentrum für Kunst und Medientechnologie Karlsruhe (ZKM))
- 07.07.1998** Dr. Gerton Lunter (University of Groningen, Niederlande):
Computing versal deformations of Hamiltonian systems using Groebner bases
- 10.07.1998** Prof. Richard E. Ewing (Texas A&M University, USA):
Mathematical Modeling and Simulation for Applications of Fluid Flow in Porous Media
- 10.07.1998** Prof. Dr. Jinchao Xu (Pennsylvania State University, USA):
Some Efficient Iterative Methods for Finite Element Equations on Unstructured Grids
- 08.09.1998** Prof. Dr. Ivo Babuska (TICAM, The University of Texas at Austin, USA):
Reliability of the Finite Element Analysis
- 29.09.1998** Prof. Dr. Vadim G. Korneev (St. Petersburg State University, Russia):
Solving the h-p-version systems of equations in two and three dimensions by Schwarzs methods
- 23.10.1998** Prof. Dr. Marek Niezgodka (ICM, Warsaw University, Polen):
Mathematical modes of diffusive phase separation: interplay of different scales, coupled driving mechanisms
- 03.11.1998** Riko Jacob (BRICS (Basic Research in Computer Science), Dänemark):
Models and Efficient Algorithms for Routing Problems in Time Dependent and Labeled Networks
- 07.12.1998** Prof. Dr. Fritz Colonius (Institut für Mathematik, Universität Augsburg):
Dynamik gestörter Differentialgleichungen

16.12.1998 Prof. Dr. Gerhard Keller (Mathematisches Institut, Universität Erlangen):
Störungstheorie für Transfer-Operatoren chaotischer dynamischer Systeme

8.2 Gastaufenthalte am ZIB

Kazutoshi Ando (Universität Kyoto, Japan)
01.12.1997–30.11.1998

Kurt M. Anstreicher (University of Iowa, USA)
15.–17.11.1998

Venkataramanan Balakrishnan (Purdue University, USA)
15.–17.11.1998

Hans Becker (SUB Göttingen)
12.–15.11.1998

Aharon Ben-Tal (Technion, Israel)
15.–17.11.1998

Frédéric Bonnans (INRIA, Frankreich)
15.–17.11.1998

Jonathan Borwein (Simon Fraser University, Kanada)
12.–15.11.1998

Dietrich Braess (Ruhr-Universität Bochum)
04.11.1998

Wolfram Büttner (Siemens AG, München)
18.–19.05.1998

Ingrid Daubechies (Princeton University, USA)
28.–30.05.1998

Oliver Deussen (Universität Magdeburg)
06.07.1998

Wolfgang Emmerich (University College London, U.K.)
06.04.1998

John Ewing (American Mathematical Society, USA)
12.–15.11.1998

Mama Foupouagnigni (Université Nationale du Bénin, Bénin)
01.09.1997–28.02.1998 (DAAD-Stipendiat)

Laurent El Ghaoui (ENSTA)
15.–17.11.1998

- Michel X. Goemans** (CORE, Belgien und MIT, USA)
15.–17.11.1998
- Donald Goldfarb** (Columbia University, USA)
15.–17.11.1998
- M. Eduard Gröller** (Technische Universität, Wien, Österreich)
06.02.1998
- Anthony C. Hearn** (Santa Monica, USA)
18.10.1998–25.10.1998
- Eberhard Hilf** (Universität Oldenburg)
12.–13.11.1998
- Marlis Hochbruck** (Universität Kaiserslautern)
24.–6.03.1998
- Wilfrid Hodges** (University of London, UK)
13.–15.11.1998
- Ronald Hoppe** (Universität Augsburg)
01.–03.10.1998
- Claude Huchet** (INRIA Sophia–Antipolis, Frankreich)
20.10.1997–01.10.1998 (gefördert vom EU–Projekt OpenMath)
- Riko Jakob** (BRICS, Niederlande)
02.11–04.11.1998
- Florian Jarre** (Universität Würzburg)
15.–17.11.1998
- Jürgen Kallies** (Universität zu Köln)
12.–15.11.1998
- Michael Kaplan** (TU München)
12.–15.11.1998
- Gerd Kaupp** (Universität Oldenburg)
12.–15.11.1998
- Steffen Kirchner** (Humboldt-Universität zu Berlin)
05.01.1998
- Krzysztof C. Kiwił** (Systems Research Institute, Polish Academy of Sciences,
Polen)
09.–13.03.1998
- Masakazu Kojima** (Tokyo Institute of Technology, Japan)
15.–17.11.1998
- Monique Laurent** (CWI Amsterdam, Niederlande)
15.–17.11.1998

- Marianne Leitner** (Universität Leipzig)
01.09.1998–30.09.1998 (Praktikantin)
- Thomas Liebling** (EPFL, Lausanne, Schweiz)
16.–19.05.1998
- Bernd Lintermann** (Zentrum für Kunst und Medientechnologie Karlsruhe (ZKM))
06.07.1998
- Konstantin Lipnikov** (Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Rußland)
02.11.–12.12.1998
- László Lovász** (Yale University, USA)
15.–17.11.1998
- Axel Klar** (FU Berlin (damals: Universität Kaiserslautern))
13.–14.07.1998
- Reinhard März** (Siemens AG, München)
30.09.–03.10.1998
- Peter Michor** (Universität Wien, Österreich)
12.–14.11.1998
- David Morrison** (Duke University, USA)
12.–15.11.1998
- Yurii Nesterov** (CORE, Belgien)
15.–17.11.1998
- Carlos Nieto de Castro** (Universidade de Lisboa, Portugal)
26.–28.08.1998
- Michael L. Overton** (Courant Institute, USA)
15.–17.11.1998
- Marc Pfetsch** (Cornell University, USA)
07.01.–10.01.1998
- Lorant Porkolab** (Max-Planck-Institut für Informatik)
15.–17.11.1998
- Peter Rentrop** (TH Darmstadt)
30.09.–03.10.1998
- Werner C. Rheinboldt** (University of Pittsburgh, USA)
18.–20.05.1998
- Alf van der Poorten** (Macquarie University, Australien)
12.–15.11.1998

- Franz Rendl** (Universität Klagenfurt, Österreich)
15.–17.11.1998
- Peter Richter** (Universität Bremen)
16.03.1998
- Joachim Römelt** (Bayer AG, Leverkusen)
19.05.1998
- Francisco Santos** (Universidad de Cantabria, Santander, Spanien)
18.–25.01.1998
- Norbert Schappacher** (Universität Straßburg, Frankreich)
28.–30.05.1998
- Dr. Bettina Schnor** (Universität Lübeck)
16.–17.03.1998
- Dieter Schütt** (Siemens AG, München)
18.–19.05.1998
- Roland Schwänzl** (Universität Osnabrück)
12.–15.11.1998
- Jos Sturm** (Maastricht University, Niederlande)
15.–17.11.1998
- Tamás Terlaky** (Delft University of Technology, Niederlande)
15.–17.11.1998
- Michael J. Todd** (Cornell University, USA)
15.–17.11.1998
- Lieven Vandenberghe** (UCLA, USA)
15.–17.11.1998
- Thomas Weiland** (TH Darmstadt)
01.–03.10.1998
- Team of Information Technology Professionals** (Leitung: Dr. Kirk Wilcox, University of Colorado, USA)
27.05.1998
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)
19.05.1998
- Thomas Wolf** (Queen Mary and Westfield College, London, U.K., ZIB Fellow)
06.04.1998–09.04.1998
- Laurence Wolsey** (CORE, Belgien)
06.12–07.12.1998
- Yinyu Ye** (University of Iowa, USA)
15.–17.11.1998

Jochem Zowe (Universität Erlangen-Nürnberg)

15.–17.11.1998

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

09.01.1998 1. BMB+F Workshop Diskrete Mathematik, Verkehr und Einsatzplanung

Veranstalter: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Andreas Löbel

10.–11.01.1998 10th OpenMath Workshop, ZIB

Veranstalter: Marc Gaetano, Claude Huchet, Winfried Neun

14.–15.02.1998 4. Math-Net-Workshop, Universität Göttingen

Veranstalter: Wolfgang Dalitz

11.03.1998 regionaler Math-Net-Workshop Berlin-Brandenburg, ZIB

Veranstalter: Wolfgang Dalitz, Vincent Winczewski

13.03.1998 Workshop „OC-12 im Berliner Hochschulnetz“; Veranstalter: Barbara Märsch, ausgerichtet von Telemation und Fore Systems

05.–06.03.1998 15. Treffen des Arbeitskreises UNICOS, ein Arbeitskreis aller Betreiber von Cray-Rechnern im deutschsprachigen Raum; Veranstalter:

Hubert Busch, Hans-Hermann Frese, Ralf Götz

04.-05.04., 09.-10.05., 28.11.1998 Einführung in das Internet für Mediziner
Veranstalter: Thomas Steinke (ZIB) in Zusammenarbeit mit ZENECA GmbH

04.–05.06.1998 5. Math-Net-Workshop, Universität München

Veranstalter: Wolfgang Dalitz

04.–05.06.1998 ZKI Arbeitskreis Multimedia & Grafik, WRAKG

Veranstalter: Olaf Paetsch (ZIB)

24.06.1998 Besuch der Schülerinnen und Schüler der Herder-Oberschule, Berlin-Westend

29.06.–03.07.1998 Einführung in SQL – Schulung für Systembibliothekare der Berliner Universitätsbibliotheken

Veranstalter: Stefan Lohrum

01.–02.10.1998 10. Sitzung des Arbeitskreises Supercomputing der „Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.“ (ZKI); Veranstalter: Hubert Busch, Hans-Hermann Frese

06.10.1998 Sun Day am Konrad-Zuse-Zentrum; Veranstalter: Wolfgang Pyszkalski, ausgerichtet von Sun Microsystems

- 26.–28.10.1998** Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund mit einem Workshop „Museumsberatung als Beruf in der Dokumentation“. Veranstaltung in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde und der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin
Veranstalter: Carlos Saro
- 11.11.1998** Besuch der Schülerinnen und Schüler der Carl-von-Ossietzky Oberschule, Berlin-Kreuzberg (Preisträger: ICM '98 „Kunst und Mathematik“ Wettbewerb)
- 13.–14.11.1998** CEIC-Workshop der IMU „Committee on Electronic Information and Communication“, ZIB
Veranstalter: Martin Grötschel, Wolfgang Dalitz
- 15.–17.11.1998** Semidefinite Programming: Applications and Algorithms
Veranstalter: Christoph Helmberg, Martin Grötschel
- 04.–05.12.1998** 6. Math-Net-Workshop, Universität Kaiserslautern
Veranstalter: Wolfgang Dalitz
- 17.12.1998** 1. Arbeitsgespräch der Berliner/Potsdamer Teilnehmer am Gigabit-Testbed-Projekt des DFN-Vereins; Veranstalter: Hubert Busch, Wolfgang Pyszkalski

8.4 Mitveranstalter von Tagungen

Peter Deuffhard

- 20.–24.07.1998** *Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods (DDM11)*, University of Greenwich, Scientific Committee/European Affairs Advisor. Organisatoren: M. Cross, C-H. Lai, K. Chen, A. Craig, M.G. Everett, I.G. Graham, K.A. Pericleous. Scientific Committee: P. Bjorstad, J. Bramble, T. Chan, P. Deuffhard, R. Glowinski, R. Hoppe, H. Kawarada, D. Keyes, Y. Kutznetsov, J. Periaux, O. Pironneau, Z. Shi, O. Widlund, J. Xu
- 16.–20.09.1998** *Workshop “Scientific Computing in Medicine” (SCMED '98)*, Royal Marsden Hospital, London. Organisatoren: J. Bille, P. Deuffhard, A. Louis, W. Schlegel, S. Webb
- 30.09.–02.10.1998** *Workshop “Scientific Computing in Electrical Engineering” (SCEE '98)*, WIAS, Berlin. Organisatoren: P. Deuffhard, H. Gajewski, G. Hebermehl, W. Heinrich, A. Kost, U. Langer, T. Weiland

Hans-Hermann Frese

- 15.–19.06.1998** *40th Cray User Group Conference*, Stuttgart

Karin Gatermann

13.–15.08.1998 *ISSAC '98*, Rostock, Programm-Komitee. Organisation: V. Weispfenning

Martin Grötschel

06.–07.02.1998 *Kick-off-Workshop des DFG-Schwerpunktprogramms "Echtzeit-Optimierung großer Systeme"*, Dresden

16.–17.02.1998 *IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: "Wege in die Zukunft – Elektronische Zeitschriften II"*, Humboldt-Universität zu Berlin

11.03.1998 *Regionaler MathNet-Workshop Berlin-Brandenburg*, Berlin

16.–18.03.1998 *IuK-Workshop der wissenschaftlichen Fachgesellschaften: "Integrierte wissenschaftliche Informationssysteme"*, Hamburg

03.–04.06.1998 *5. MathNet-Workshop*, München

15.–16.08.1998 *13. General Assembly der International Mathematical Union*, Dresden

18.–27.08.1998 *International Congress of Mathematicians 1998 (ICM'98)*, Berlin

05.–07.11.1998 *Berichtskolloquium des DFG-Schwerpunktprogramms "Echtzeit-Optimierung großer Systeme"*, Rolduc, Niederlande

13.–14.11.1998 *Brainstorming Workshop der IMU Commission on Electronic Information and Communication (CEIC)*, ZIB

15.–17.11.1998 *Workshop "Semidefinite Programming: Applications and Algorithms"*, ZIB

Hans-Christian Hege

20.–27.08.1998 *VideoMath Festival (Internationales Filmfestival für Filme mit mathematischem Bezug – eine Veranstaltung im Rahmen des International Congress of Mathematicians 1998)*, Berlin, Urania; gemeinsam mit Konrad Polthier (TU Berlin)

Alexander Reinefeld

21.–23.04.1998 *HPCN'98*, Amsterdam

20.–22.05.1998 *HPCS'98*, Edmonton, Alberta, Canada

25.–27.08.1998 *Euromicro Workshop on Network Based Computing*, Västerås, Schweden

26.–28.08.1998 *Massively Parallel and Superscalar Applications in Computational Material Science*, Universität-GH Paderborn

29.–30.09.1998 *SCI Europe'98*, Bordeaux

8.5 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

04.03.1998 Albert-Einstein-Institut für Gravitationsphysik der Max-Planck-Gesellschaft, Potsdam:

Numerical Relativity Group: Amira-Demonstration; Werner Benger, Hans-Christian Hege, Detlev Stalling

19.–25.03.1998 CeBit, Hannover:

Optimierung im Nahverkehr; Ralf Borndörfer, Andreas Löbel

19.–25.03.1998 CEBIT, Hannover:

SCI Hochleistungsrechner für Electronic Commerce; Alexander Reinefeld

25.03.1998 Forschungscolloquium der Charité, Virchow-Klinikum:

HyperPlan-Demonstration; Hans-Christian Hege, Detlev Stalling, Peter Deuffhard

02.04.1998 Informationstag an der Thomas-Mann-Oberschule:

Präsentation des ZIB; Wolfgang Pyszkalski

18.–20.06.1998 Supercomputer Seminar 1998, Universität Mannheim:

Präsentation des ZIB im Rahmen der Präsentation der deutschen Supercomputing-Zentren; Hubert Busch, Thomas Steinke

27./28. und 29./30.04.1998 Alliance'98, University of Illinois, Champaign (IL) — Berlin:

Research Demonstration „Transatlantic Interactive Visualization“, in Kooperation mit dem Albert-Einstein-Institut Potsdam und anderen Partnern, siehe <http://www.zib.de/Visual/events/Alliance98>; Werner Benger, Hans-Christian Hege, Hubert Busch, Barbara Märtschenz, Wolfgang Häusler

06.05.1998 Statusgespräch im BMBF-Forschungsverbund “Standardhirn“:

Amira-Demonstration; Malte Zöckler, K.H. Rein

15.05.1998 Einweihung des Hochleistungsgrafikrechners (ZIB):

Amira-Demonstration; Hans-Christian Hege, Detlev Stalling, Malte Zöckler

04.07.1998 Tag der offenen Tür, Charité:

HyperPlan-Demonstration; Martin Seebaß, J. Gellermann, P. Wust

07.08.1998 National Center of Supercomputer Applications (NCSA):

Amira-Demonstration; Werner Benger

- 11.08.1998** Washington University, St. Louis, Dept. of Physics:
Amira-Demonstration; Werner Benger
- 22.08.1998** ICM 1998, Berlin, Session on Mathematical Software:
Vortrag und Software-Demonstration: ODELab – an Electronic WWW-Laboratory for the Numerical Treatment of ODEs
- 10.09.1998** Feierlichkeiten anlässlich des fünfjährigen Bestehens der Berufsakademie Berlin:
Präsentation des ZIB; Klaus Jacobsen
- 02.10.1998** Arbeitskreis Supercomputing der ZKI (Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.):
Amira-Demonstration; Hans-Christian Hege, Detlev Stalling, Malte Zöckler
- 10.–12.11.1998** Supercomputing '98, Orlando (FL, USA) — Berlin:
Transatlantic Simulation and Visualization of Colliding Neutron Stars, in Kooperation mit dem Albert-Einstein-Institut Potsdam (MPG) und anderen Partnern,
siehe <http://www.zib.de/Visual/events/Supercomputing98>; Werner Benger, Hans-Christian Hege, Hubert Busch, Barbara Märschenz, Wolfgang Häusler

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 1998 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Monika Schäfer-Korting, FUB
- Prof. Dr. Konrad Gröger, HU, stellv. Vorsitzender — bis 31.08.1998
Prof. Dr. Elmar Kulke, HU, stellv. Vorsitzender — ab 01.09.1998
- StS Prof. Dr. Erich Thies, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — bis 30.09.1998
StS Prof. Dr. Ingolf Hertel, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — ab 01.10.1998
- Peter Schallock, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe — bis 31.12.1997
Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe — ab 01.06.1998
- Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Erich te Kaat, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH — bis 20.04.1998
Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH — ab 21.04.1998
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 30. November 1998.

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. Wolfram Büttner	– Siemens AG, München (ab 19.05.1998)
Prof. Dr. Thomas Liebling	– Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens
Prof. Dr. Hanns–Jürgen Lichtfuß	– Technologiestiftung Berlin (ab 01.01.1998)
Prof. Dr. Alfred Louis	– Universität des Saarlandes, Saarbrücken (ab 01.01.1999)
Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt	– University of Pittsburgh, Pittsburgh (bis 31.12.1998)
Dr. Joachim Römelt Manfred Schneider	– Bayer AG, Leverkusen – Krone AG, Berlin (bis 31.12.1998)
Prof. Dr. Karl–Victor von Schöning	– Inpro mbH, Berlin (ab 01.01.1999)
Prof. Dr. Dieter Schütt	– Siemens AG, München (bis 19.05.1998)
Dr.–Ing. Erhard Winter	– E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 19. Mai 1998 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. Konrad-Zuse-Gesellschaft
7. NAG Users Association
8. SIAM
9. VICM 98 e.V.
10. 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 1998 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Michael Dellnitz (Universität Bayreuth)
Symbolisch-numerische Methoden für dynamische Systeme
Die Mitgliedschaft als ZIB-Fellow endete zum 30.09.1998 aufgrund des Wechsels auf eine C4-Professur für Angewandte Mathematik am Fachbereich Mathematik/Informatik der Universität-Gesamthochschule Paderborn
- Prof. Dr. Ralf Kornhuber (Universität Stuttgart)
Monotone Mehrgittermethoden
Die Mitgliedschaft als ZIB-Fellow endete zum 31.03.1998 aufgrund des Wechsels auf eine C4-Professur für Numerische Mathematik/Scientific Computing am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin
- Prof. Dr. Rüdiger Schultz (Universität Leipzig)
Ganzzahlige stochastische Optimierung
Die Mitgliedschaft als ZIB-Fellow endete zum 31.08.1998 aufgrund des Wechsels auf eine C4-Professur am Fachbereich Mathematik der Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- 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
Die Mitgliedschaft als ZIB-Fellow endete zum 30.04.1998 aufgrund des Wechsels auf eine C4-Professur am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität Berlin

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1998 wie folgt zusammen:

Peter Ertmann – Vorsitzender
Bodo Erdmann
Gabriele Kempf
Wolfgang Maibauer
Uwe Pöhle

Vertrauensmann der Schwerbehinderten war bis 31.10.1998 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 letztmaliger 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 bereitgestellt hat. Im Rahmen der Planung für den Höchstleistungsrechner Nord besteht hier erst Hoffnung für eine Ersatzbeschaffung in den Jahren 1999/2000. Die korrigierten Wirtschaftsplanansätze im Jahre 1998 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 20.913 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 20.113 TDM und auf Investitionen 850 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuß von 14.835 TDM. Die eigenen Erträge, insbesondere aus Kooperationen und Drittmittelprojekten, waren mit 4.726 TDM veranschlagt; ungeachtet einer erfreulichen Steigerung der Drittmiteleinahmen auf 5.983 TDM wird die Finanzierungslücke nur durch die Auflösung von Rücklagen aus den Vorjahren zu schließen sein.

Die in den letzten Jahren sehr positive Entwicklung der Einnahmen aus Drittmitteln, einem wesentlichen, wenn auch nicht dem einzigen Indikator für die For-

schungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, läßt sich anhand der folgenden Tabelle ablesen:

Einnahmen in den Jahren 1993 — 1998

	Drittmiteleinahmen		Zuwendungen des Landes Berlin		Einnahmen Sonstige Erträge TDM	Einnahmen insgesamt TDM
	Wirtschaft/ Industrie TDM	öffentliche Mittel TDM	konsumentiv TDM	investiv TDM		
1993	716	802	8.098	2.162	141	11.919
1994	1.779	1.713	8.302	16.244	153	28.191
1995	2.563	1.173	9.155	7.834	100	20.825
1996	2.285	1.477	9.511	1.000	98	14.371
1997	2.501	2.601	15.173 ¹	800	237	21.312
1998 ²	2.894	3.089	14.835	850	96	21.764

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (78 Stellen, — 5 Beamten- und 73 Angestelltenstellen — davon 2 Stellen ohne Bezüge und 5 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 die vollständige Finanzierung der Stellen mit Wegfallvermerk aus Eigenmitteln des ZIB 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 — ein Zustand der auf Dauer nicht haltbar ist.

¹Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

²voraussichtliches Ist 1998 – vor Prüfung durch den Wirtschaftsprüfer

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.1998	01.01.1999
Leitung	3	4
Wissenschaftliches Personal	73	66
Datenverarbeitung/Technik	26	27
Verwaltung/Bibliothek	15	17
Studentische Hilfskräfte	31	33
Insgesamt	148	147

10 Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik und Informatik der Freien Univer-
sität 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:	Prof. Dr. Peter Deuffhard/ Dr. Christof Schütte	896 04 – 101 841 85 – 182
Wissenschaftliche Software:	Dr. Ulrich Nowak	841 85 – 175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans-Christian Hege	841 85 – 141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ Dr. Alexander Martin	841 85 – 210 841 85 – 211
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85 – 173
Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	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

mail:nachname@zib.de

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind
über unseren WWW-Server unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.