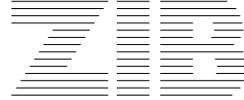


Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 1999



Vorwort

Auch in diesem Jahr legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) all seinen Freunden, Gönnern und kritischen Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft einen umfangreichen Jahresbericht vor – als Bestandsaufnahme des Geleisteten und zugleich als Rechtfertigung vor der Öffentlichkeit.

Wie schon in den Vorjahren wurden auch 1999 wieder junge Wissenschaftler wegberufen: ALEXANDER MARTIN nahm zum 1.1.2000 einen C4-Ruf auf einen Lehrstuhl für Mathematik an der Technischen Universität Darmstadt an; CHRISTOF SCHÜTTE lehnte einen C4-Ruf an die Universität Düsseldorf ab und nahm zum 1.1.2000 den Ruf an die Freie Universität Berlin auf den Lehrstuhl Numerische Mathematik/Scientific Computing mit Schwerpunkt Biocomputing an. Wie schon seit Jahren beobachten wir diese Entwicklung mit einem lachenden und einem weinenden Auge: einerseits beweist sie, daß das ZIB auf wissenschaftlichen Gebieten forscht, die auch andernorts gesucht sind; andererseits besteht die Gefahr einer sukzessiven Austrocknung des ZIB, wenn geeigneter Nachwuchs ausbleibt. Uneingeschränkt erfreulich sind hingegen die wissenschaftlichen Auszeichnungen: MARTIN GRÖTSCHEL wurde zum auswärtigen assoziierten Mitglied der National Academy of Engineering (NAE) in den USA ernannt und erhielt den Wissenschaftspreis der Gesellschaft für Operations Research (GOR), DETLEV STALLING bekam den gutdotierten Carl-Ramsauer-Preis der Firma TEMIC (früher AEG) für seine Dissertation, RALF BÖRNDÖRFER den Joachim-Tiburtius-Preis ebenfalls für seine Dissertation.

Im wissenschaftlichen Bereich ist es uns 1999 gelungen, unsere Aktivitäten insbesondere in den Schwerpunktgebieten *Biotechnologie*, *Medizinische Therapieplanung*, *Telekommunikation*, *Verkehr* und *On-line-Optimierung* signifikant auszuweiten — eine Entwicklung, die sich zum Teil erst in den kommenden Jahren in wissenschaftlichem Output wie in Drittmittelerträgen niederschlagen wird.

Zugleich ist das ZIB mehr und mehr in eine neue Rolle hineingewachsen: wir bemühen uns zunehmend erfolgreich, noch ungenutzte oder gar unerkannte regionale Synergien in unserem Wirkungsfeld freizusetzen.

Dies gilt zum Beispiel für die Entwicklung der Suchmaschine des *Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg* (KOBV), die im November 1999 ihren Dienst aufgenommen hat. Das KOBV-Projekt, vom ZIB in Zusammenarbeit mit

den Hochschulen der Region organisiert und durch die beteiligten Länder finanziell unterstützt, hat das Ziel, die hiesige reiche Bibliothekslandschaft für die Nutzer elektronisch zu erschließen. Auch überregional hat sich das ZIB intensiv im Bereich IuK engagiert, etwa im Math-Net-Projekt und bei der IuK-Initiative der wissenschaftlichen Fachgesellschaften.

Ende 1999 beteiligte sich das ZIB gemeinsam mit der Freien Universität, der Humboldt-Universität, dem Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik in Dahlem, dem Max-Delbrück-Centrum in Buch sowie dem Ressourcenzentrum zum Deutschen Humangenomprojekt in Charlottenburg an einem Antrag zur strategischen *DFG-Initiative Bioinformatik* in Forschung, Ausbildung und Service; der vom Präsidenten des ZIB (als einer von vier Verantwortlichen) mitunterzeichnete Vorantrag kam unter die letzten Neun, hoffen wir also für die im Jahr 2000 anstehende endgültige Entscheidung, die für die Berliner Wissenschaftslandschaft eine wichtige Zukunftsoption darstellen würde.

Insgesamt haben wir 1999 unsere Stellung als *zukunftsorientierte Denkfabrik für angewandte Mathematik und Informationstechnik* im nationalen wie internationalen Maßstab weiterhin festigen können. Der Wissenschaftliche Beirat des ZIB bescheinigte uns in seiner Sitzung am 17./18. Mai sogar eine "weltweit führende Stellung im *Scientific Computing*" und attestierte uns, daß wir "nicht nur mit der rasanten Entwicklung der Informationstechnik Schritt zu halten verstehen, sondern selbst z.T. als Taktgeber dafür wirken". Wir werden in der Zukunft weiterhin hart und ideenreich arbeiten müssen, um einer solchen Beurteilung gerecht zu werden.

Berlin, im April 2000

Prof. Dr. Peter Deuffhard
Präsident



Das Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin-Dahlem

Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind über unseren WWW-Server unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

Inhaltsverzeichnis

1	Das ZIB — Struktur und Ziele	1
2	Forschung und Entwicklung	6
2.1	Überblick	6
2.2	Schwerpunkte	14
2.2.1	Wesentliche Moleküldynamik	14
2.2.2	Quantenklassische Moleküldynamik	22
2.2.3	Adaptive Multilevel Finite-Elemente-Methoden	27
2.2.4	Integrierte Optik	33
2.2.5	Prozeßsimulation	37
2.2.6	Medizinische Planungssysteme	43
2.2.7	Virtuelle Labore	53
2.2.8	Diskrete Strukturen	63
2.2.9	Nichtlineare Optimierung	69
2.2.10	Telekommunikation	74
2.2.11	Ganzzahlige Optimierung	85
2.2.12	Online-Optimierung	91
2.2.13	Verkehr	96
2.3	Auszeichnungen und Rufe	100
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	102
3.1	Überblick	102
3.2	Schwerpunkte	104
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	104
3.2.2	Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)	106
3.2.3	Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Do- kumenten	109

3.2.4	IuK-Initiativen von DMV und anderen wissenschaftlichen Fachgesellschaften	111
3.2.5	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	112
3.2.6	WWW-Labors für numerische Software	114
3.2.7	REDUCE	114
4	Computer Science	116
4.1	Computer Science Research	116
4.1.1	Innovative Netzwerke und Cluster-Systeme	116
4.1.2	Werkzeuge zur effizienten Nutzung verteilter Hochleistungsrechner	118
4.2	Hochleistungsrechner	119
4.2.1	Systemkonfiguration	120
4.2.2	Software-Ausstattung	123
4.2.3	Zulassungsausschuß	124
4.2.4	Großprojekte	124
4.3	Fachberatung	126
4.3.1	Chemie	127
4.3.2	Geowissenschaften	127
4.3.3	Ingenieurwissenschaften	128
4.3.4	Physik	129
4.4	Interne Rechenzentrumsdienste	130
4.5	Sicherheit	130
4.6	Weitere Projekte des Bereiches Computer Science	131
4.6.1	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	131
4.6.2	Gigabit-Testbed Projekt „KoMaB“	136
4.6.3	Gigabit-Testbed Projekt „GÜTE“	137
4.6.4	Gigabit-Testbed Projekt „Meta“ (Metacomputing durch Kopplung von Hochleistungsrechnern)	138
4.6.5	UNICORE	141
4.7	Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren	142
4.7.1	Norddeutscher Vektorrechner-Verbund (NVV)	142
4.7.2	Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)	143
4.7.3	Zusammenarbeit mit anderen Hochleistungsrechenzentren	143

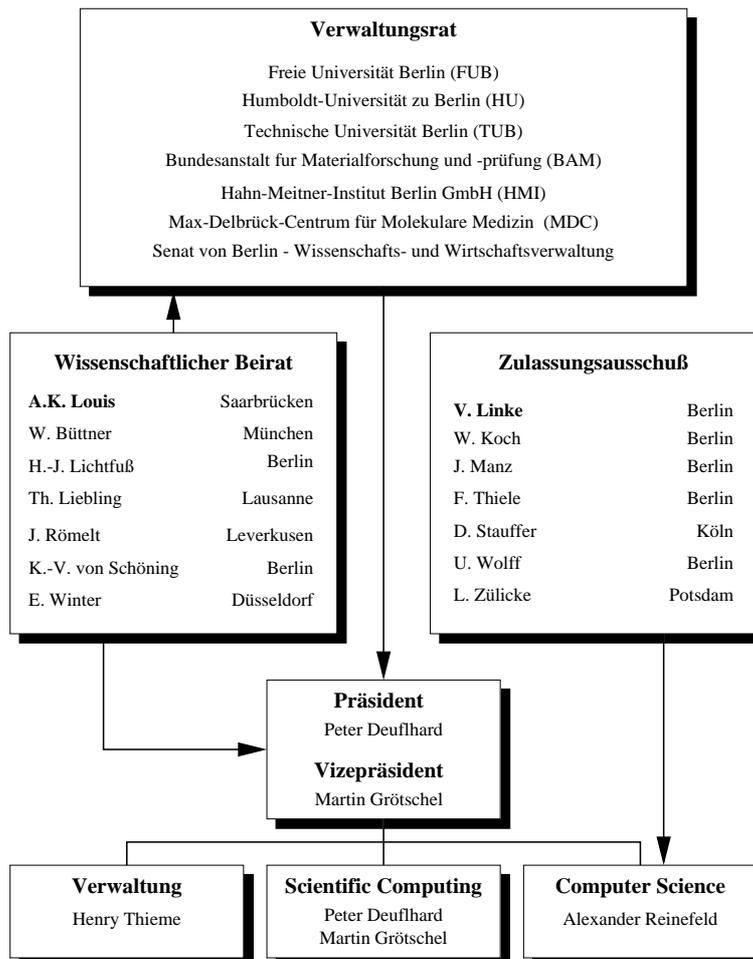
5	Publikationen	145
5.1	Preprints	145
5.2	Mitherausgabe von Zeitschriften	164
5.3	Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	164
5.4	Monographien	170
5.5	Habilitationen	170
5.6	Dissertationen	171
5.7	Diplomarbeiten	171
6	Produkte	173
6.1	A–Max (Version 3.0)	173
6.2	moregroebner (Version 3.0)	173
6.3	symmetry (Version 3.0)	173
6.4	CodeLib	174
6.5	Amira	174
6.6	HyperPlan	174
6.7	DOC++	175
6.8	VTL	175
6.9	iTe	175
6.10	Verfahren aus der Computeralgebra	176
6.11	Verfahren aus der Optimierung	178
6.12	Informationsdienste des eLib–Servers	178
6.13	Fremd- und Normdatenserver	179
6.14	KOBV-Informationsserver	180
6.15	KOBV-Suchmaschine	180
6.16	WWW–Z39.50 Gateway	181
6.17	Math-Net Informationsserver	181
6.18	Informationsdienste des eLib–Servers	181
6.19	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	183
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern	184
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	184
7.2	Vorlesungen und Seminare	205
8	Tagungen und Gäste des ZIB	208

8.1	Gastvorträge am ZIB	208
8.2	Gastaufenthalte am ZIB	210
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	213
8.4	Mitveranstalter von Tagungen	215
8.5	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	216
9	Organisatorisches	218
9.1	Organe	218
9.2	Satzung	219
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	219
9.4	Mitgliedschaften	219
9.5	ZIB-Fellows	220
9.6	Selbstverwaltung	220
9.7	Wirtschaftliche Situation	220
9.8	Personelle Entwicklung	222
10	Ansprechpartner	223

KAPITEL 1

Das ZIB — Struktur und Ziele

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin. Es betreibt in enger fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik, 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

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* Ende 1998 und die damit verbundene inhaltliche Erweiterung des fachlichen Spektrums wird in den nächsten Jahren ein Forschungsschwerpunkt auf dem Gebiet *Computer Science* aufgebaut.

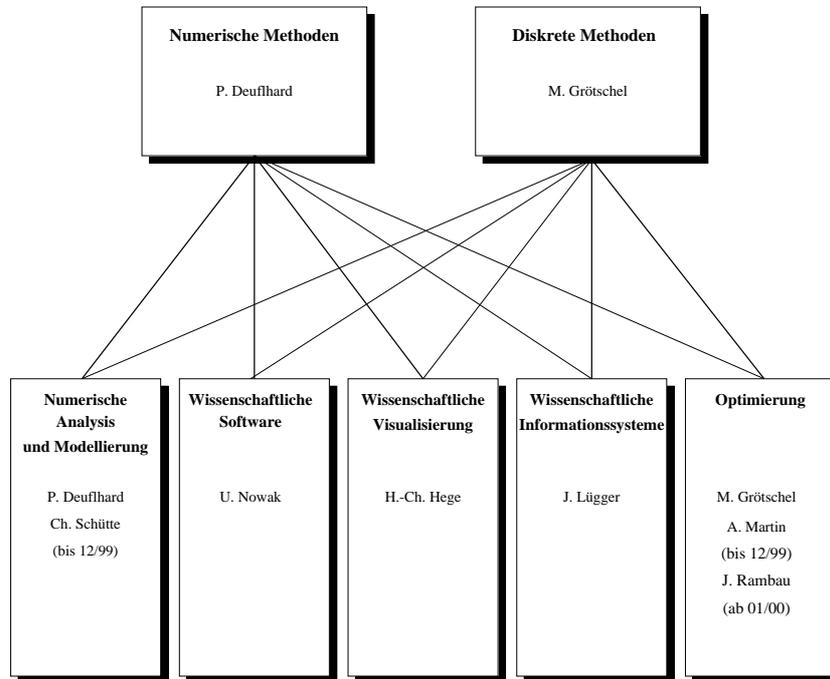
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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.

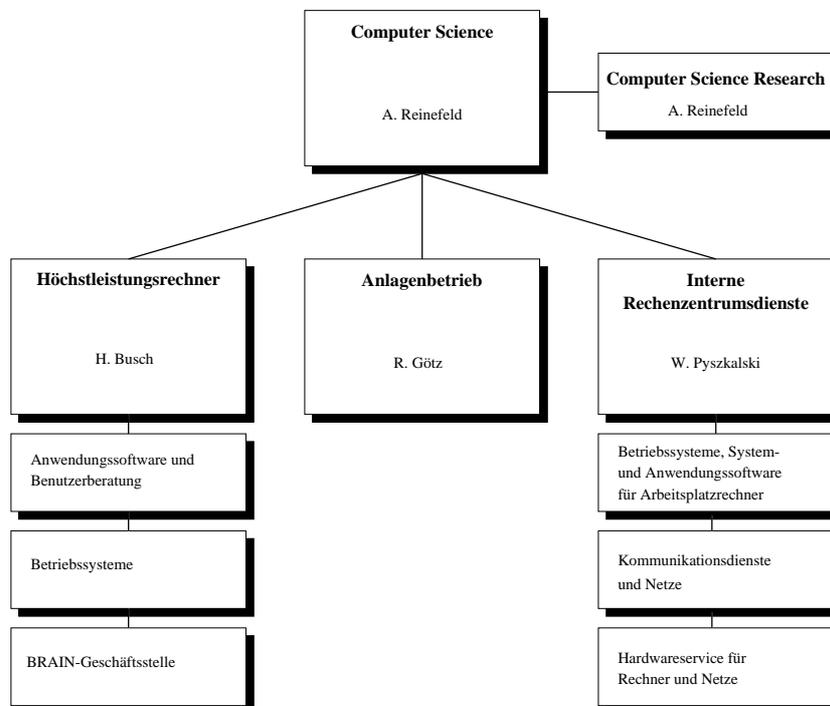
Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer, derzeit des Herstellers SGI/CRAY) 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 Fachberater 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 sind die Projekte “Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)” und “Informationstechnische Werkzeuge für Museen”. 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.

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 im Bereich *Scientific Computing* zusammen mit wenigen herausgehobenen Einzelprojekten aufgeführt; entsprechende Projekte zur Thematik *Computer Science* finden sich vorläufig noch unter Punkt 4.1.

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 Moleküldynamik
- Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden
- Virtuelle Labore

Aus der Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit wie 1998 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 seit drei Jahren laufende Schwerpunktthema hat sich im Berichtszeitraum beträchtlich ausgeweitet. Ins Blickfeld rückten zunehmend größere, wenn auch immer noch recht moderate Biomoleküle, wie sie in der Biotechnologie und in der Molekularen Medizin eine Rolle spielen. Grundlegend für unsere mathematische Herangehensweise ist nach wie vor der über die *Dynamik* definierte Begriff der *metastabilen Konformation*, nicht zu verwechseln mit dem herkömmlichen Begriff der *geometrischen Konformation*, der typischerweise in der Bioinformatik realisiert wird. Auch mit letzterem Begriff haben wir uns 1999 als algorithmischem Vorlaufschritt intensiv beschäftigt, u.a. mit Mitteln aus dem noch recht jungen Gebiet des *Data Mining*. Grundidee ist eine in den vergangenen Jahren am ZIB entwickelte *Perron-Cluster-Analyse* für stochastische Übergangsoperatoren. Eine maßgeschneiderte Galerkin-Diskretisierung des Operators erfolgt durch *hybride Monte-Carlo-Methoden* (HMC), die zugleich den Hauptteil des Rechenaufwandes darstellen. Im Rahmen einer seit zwei Jahren laufenden Dissertation wurde mittels geeigneter Einbettung des Ausgangsproblems über eine geschickt gewählte Folge von *Simulationstemperaturen* eine hierarchische Behandlung dieses Teils des Problems erreicht – im Sinne einer Uncoupling/Coupling-Monte-Carlo (UCMC) Methode, die sich zugleich in natürlicher Weise zur Parallelisierung des Hauptaufwandes eignet. Im Rahmen einer 1999 neubegonnenen Dissertation wurden Methoden des Data Mining (neuronale Netze, selbstorganisierende Abbildungen nach KOHONEN) herangezogen, um eine effiziente Boxendiskretisierung für die HMC-Methode zu berechnen. Beide Methoden mussten herangezogen werden für die Behandlung erster größerer Moleküle von industriellem und medizinischem Interesse. Seit Dezember 1999 werden unsere diesbezüglichen Arbeiten innerhalb des Berliner Technologie-Netzwerkes RINA (Sprecher: V. Erdmann, Biochemie, FUB) durch umfangreiche Mittel aus dem europäischen EFRE-Programm gefördert. Darüber hinaus wird schon seit Februar 1999 ein Forschungsprojekt über sog. *Virtuelles Screening* direkt von der Biotech-Firma AnalytiCon, Potsdam, unterstützt. Eine weitere Industrieförderung (Fa. Roche Diagnostics, Penzberg) zum Thema Protein-Bioreaktor ist seit Jahresende 99 in Vorbereitung. Der grundlagenorientierte Teil dieser Arbeiten wird innerhalb des DFG-Schwerpunktes “Dynamische Systeme” (Sprecher: B. FIEDLER, Mathematik, FUB) bis zu dessen Auslaufen Mitte 2000 gefördert; in diesem Teil wurde der Zusammenhang unserer Methodik mit einer vergleichbaren Methodik über Langevin-Dynamik studiert, nicht zuletzt mit Blick auf algorithmische Effizienz. In diesem Zusammenhang darf nicht unerwähnt bleiben, daß

C. SCHÜTTE, dessen Habilitationsschrift eine wichtige Basis für die Arbeit in diesem Themenschwerpunkt darstellt, im Berichtszeitraum zwei C4-Rufe erhalten hat (U Düsseldorf, FU Berlin); seit 1.1.2000 ist er nun an der FU, so daß sich die Arbeitsgruppe zunächst einmal geteilt hat – mit der Perspektive einer weiterhin geplanten engen Kooperation in diesem Themenfeld.

Quanten-klassische Moleküldynamik. Die volle quantenmechanische Simulation molekularer Systeme erscheint auf absehbare Zeit jenseits des Rechenbaren. Im Berichtszeitraum wurden wie im Vorjahr vorrangig *nicht-adiabatische* Kopplungen der hochfrequenten quantenmechanischen Dynamik an die langsamen “klassischen” Bewegungen behandelt. Eine Dissertation über deren effiziente numerische Simulation konnte Ende 99 abgeschlossen werden (leider ging der Mitarbeiter dann auf eine gutdotierte Stelle in einer Bank – ein verbreitetes Phänomen im Fachgebiet Scientific Computing). Darüber hinaus wurde eine quanten-klassische *Liouville-Gleichung* (QCL) hergeleitet, die als Unteroutine die am ZIB in den letzten Jahren entwickelten QCMD-Algorithmen benötigt. Die Thematik wird innerhalb des DFG-Schwerpunktes “Zeitabhängige Phänomene und Methoden in Quantensystemen” gefördert. Die diesen Schwerpunkt tragenden Mitarbeiter sind seit Beginn 2000 an der FU, Lehrstuhl Numerische Mathematik/Scientific Biocomputing (C. SCHÜTTE) – mit der Folge, daß in Zukunft diese Thematik dort weiterverfolgt werden wird.

Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden. Dieses seit vielen Jahren laufende Grundlagenprojekt hat musterhaft zu zahlreichen Folgeprojekten in den Anwendungen geführt, z.B. in der Integrierten Optik (vgl. 2.2.4), der Prozeß-Simulation (vgl. 2.2.5) oder bei Medizinischen Planungssystemen (vgl. 2.2.6). Dort sind auch anwendungsrelevante Fortschritte im einzelnen dargestellt. Die bereits im vorangegangenen Jahr angebahnte fachliche Zusammenarbeit mit dem Weierstraß-Institut (WIAS) und der Arbeitsgruppe KORNHUBER (Mathematik, FUB) hat sich weiter gefestigt, u.a. durch gemeinsame Lehrveranstaltungen an der FUB. Im Berichtszeitraum stand als Forschungsthema im Grundlagenbereich die Weiterentwicklung von *kaskadischen Mehrgittermethoden* für elliptische Probleme mit starken Materialsprüngen weiterhin im Vordergrund. Durch Einführung finiter Mörtel-Elemente und eines unterraumorientierten Glätters für nichtkonforme Gitter an Grenzflächen konnten erstmalig die konformen adaptiven Multilevelmethoden an Rechenzeit unterboten werden. Als weiteres Projekt wurden neue Methoden zeitangepaßter Gittersteuerung für Diffusions-Reaktions-Probleme in Kooperation mit R.D. RUSSELL, Vancouver, vorangetrieben. Algebraische Mehrgittermethoden für die harmonische Maxwell-Gleichung bei hoher Frequenz wurden weiterentwickelt und im adaptiven Kontext getestet; ihre Bewertung dauert noch an. Als ersten Schritt in Richtung auf die Behandlung von Problemen der optimalen Steuerung wurden im Rahmen einer Dissertation adaptive Multilevel-Methoden (zunächst in 1D) hergeleitet, die auf Innere-Punkte

Methoden im Funktionenraum aufbauen; erste numerische Tests erscheinen vielversprechend.

Integrierte Optik. Unsere Arbeiten innerhalb eines BMBF-Projektes zur Berechnung von Moden verlustbehafteter integriert-optischer Komponenten wurden 1999 weitergeführt. Ziel ist die Berechnung der *vektoriellen* Grundmoden optischer Wellenleiter auf der Basis der vollen Maxwell'schen Gleichungen. Im Anschluss an einen ersten ARNOLDI-artigen Algorithmus, der unseren Industriepartner Infineon bereits weitgehend zufriedengestellt hat, wurden im Berichtszeitraum nunmehr die eigentlich wissenschaftlich angepeilten Mehrgittermethoden gefunden und getestet. Dabei wurden zwei verschiedene Strategien verfolgt. Zum einen wurde eine für die optischen Probleme passende vektorielle Formulierung in Knotenbasen gefunden, auf die unsere im Vorgängerprojekt entwickelte Mehrgitter-Methode angewendet werden kann. Zum anderen wurde auch ein Konzept für einen auf Kantenelementen basierenden Mehrgitterlöser entworfen und an einigen Beispielen erfolgreich getestet. Die von uns entwickelten Algorithmen werden unserem Industriepartner als integrierte Softwareumgebung "ModeLab" zur Verfügung gestellt. Die im Zusammenhang mit optischen Simulationen auftretenden Streuprobleme verlangen die Konstruktion geeigneter *transparenter Randbedingungen*. Vollkommen analoge Probleme treten auch in Akustik und Quantenmechanik auf. Das von uns verfolgte Konzept eines semi-diskreten Lösungsansatzes im Außenraum erlaubt uns eine einheitliche Konstruktion transparenter Randbedingungen für verschiedene Gleichungstypen, allgemeine Grundgebiete sowie für eine Klasse inhomogener Außenräume. Im Berichtszeitraum wurden die transparenten Randbedingungen für Weitwinkel-Vorwärts-Helmholtzgleichungen beliebiger Ordnung theoretisch hergeleitet und praktisch implementiert. Die erfolgreiche Behandlung der 2D-Helmholtzgleichung ermöglicht es nunmehr, die Simulation der 2D-Schrödingergleichung auf unbeschränkten Gebieten in Angriff zu nehmen.

Prozeß-Simulation. Die Simulation zeitabhängiger Prozesse in Chemie und Verfahrenstechnik ist ein schon über Jahre laufender Schwerpunkt. In der von der DFG geförderten Kooperation mit der Arbeitsgruppe ADLER (Ingenieurwissenschaften, Universität Halle-Wittenberg) wurden Verfahren zur effizienten Simulation von Kombinationsreaktormodellen weiterentwickelt. Methodischer Schwerpunkt waren Linienmethodenansätze, die auf große, speziell strukturierte Systeme von differentiell-algebraischen Gleichungen führen, die mittels unseres linear-impliziten *Extrapolationscodes* LIMEX robust und effizient gelöst werden. Erste Untersuchungen zur Frage der Sensitivität und Identifizierbarkeit von Modellparametern wurden vorgenommen. Im Rahmen dieser Kooperation kommt auch der *adaptive Multilevel-FEM-Code* KARDOS zum Einsatz, um spezielle Untersuchungen an einzelnen Reaktorkomponenten durchzuführen. In der ebenfalls von der DFG geförderten Kooperation mit der Arbeitsgruppe SCHABER (Verfahrenstechnik, Universität Karlsruhe) wurden die Arbeiten zur Mo-

dellierung und Simulation von Aerosolbildung in verfahrenstechnischen Anlagen fortgeführt. Im Vordergrund der Arbeiten stand dabei die Neufassung der Modellierung auf der Basis von Populationsbilanzen. Dadurch soll eine effiziente Behandlung mittels adaptiver Finite-Elemente-Methoden sowie allgemeinerer Galerkin-Methoden ermöglicht werden. Im Berichtszeitraum konnten durch Software-Lizenzen zu den Programmen LIMEX, KARDOS und KASKADE beachtliche Einnahmen aus der Industrie erzielt werden.

Medizinische Planungssysteme. Wichtigste Plattform für unsere Aktivitäten ist nach wie vor der Sonderforschungsbereich "Hyperthermie: Methodik und Klinik" sowie das Graduiertenkolleg "Temperaturabhängige Effekte für die Therapie und Diagnostik". Im Berichtszeitraum wurden am ZIB zwei Diplomarbeiten zur *Segmentierung dreidimensionaler biomedizinischer Bilddaten* abgeschlossen, die auf einem regionenbasierten bzw. einem konturenbasierten Ansatz (*Snake-Verfahren*) beruhen. In enger Kooperation innerhalb des Projektbereichs A (Technologische Weiterentwicklung) des Sonderforschungsbereiches wurde der neue Hyperthermie-Applikator *Sigma-Eye* der Firma BSD analysiert. Dabei wurde das elektrische Feld im Applikator einerseits mit den am ZIB entwickelten adaptiven Multilevel-Maxwell-Lösern simuliert, andererseits mittels eines opto-elektronischen Sensors vermessen. Auf diese Weise konnte ein wichtiger Beitrag zum technischen Verständnis der Apparatur geleistet und darauf aufbauend neue Ideen zu ihrer weiteren Optimierung entwickelt werden. Parallel dazu wurde die Entwicklung eines SFB-eigenen Hyperthermie-Applikators fortgeführt. Vorrangiges Ziel ist die Entwicklung eines offenen MRI-Applikators in der Klinik, was Kompatibilität des Applikators mit simultaner Bildgebung durch Magnetresonanz-Tomographie voraussetzt. Im Berichtszeitraum wurde, unterstützt durch unsere numerischen Simulationen, ein Prototyp eines solchen Applikators entwickelt. In Erweiterung unseres medizintechnischen Spektrums wurde im vierten Quartal des vergangenen Jahres ein neues Projekt zum Thema *computergestützte Chirurgie* (CAS: computer assisted surgery), speziell in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, begonnen. Ziel ist, Chirurgen bei der Planung komplexer chirurgischer Eingriffe zur Korrektur angeborener bzw. unfall- oder tumorbedingter Knochendefekte zu unterstützen. Hierbei werden interdisziplinär, in enger Kooperation mit der Klinik und Poliklinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie der TU München (Klinikum rechts der Isar, Dr. Dr. ZEILHOFER, Dr. Dr. SADER) Verfahren entwickelt, die eine möglichst genaue computerunterstützte Planung der Trennung, Reorganisation und Restauration von mißgebildeten oder zerstörten Knochenstrukturen ermöglichen. Darüber hinaus wird auch die Vorhersage der nach Operation zu erwartenden Gesichtsform durch Finite-Elemente-Simulation des Weichgewebeverhaltens als zusätzliches Planungskriterium bereitgestellt. Die Entwicklung solcher fortgeschrittenen Planungsverfahren sowie der mechanischen Modelle biologischer Gewebe orientiert sich dabei eng am Bedarf der Chirurgen: neben der funktionellen ist auch die

ästhetische Rehabilitation in optimaler Form sicherzustellen. Fernziel unserer Bemühungen ist, die Simulation der zu erwartenden *Gesichtsmimik* in die Vorabplanung einzubeziehen. Unsere Planungsmethoden sollen zugleich Patienten vorab in ihrer Entscheidungsfindung für oder gegen eine Operation unterstützen.

Virtuelle Labore. 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. Die Kombination von innovativen Algorithmen mit modernen Konzepten aus dem Software-Design hat **Amira** zu einem Werkzeug gemacht, das den am Markt verfügbaren Lösungen in vielen Bereichen überlegen ist. Insbesondere im schnell wachsenden Bereich der 3D-Bilddatenverarbeitung und -visualisierung gibt es eine große Nachfrage nach leistungsfähigen und einfach bedienbaren Programmen, die bisher nicht befriedigt werden konnte. Um dieses Potential zu nutzen, wurde im Mai 1999 die Spin-off Firma *Indeed - Visual Concepts GmbH* gegründet, die u.a. **Amira** kommerziell vermarkten wird. Seit Ende 1999 ist die erste kommerzielle Version von **Amira** erhältlich und wird von der Partnerfirma *Template Graphics Software Inc. (TGS)* weltweit vertrieben. Gleichzeitig wurde von *Indeed* die Software auf die Windows Plattform portiert. Diese Version ist seit April 2000 kommerziell verfügbar.

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) und durch Berufungen von ehemaligen Mitarbeitern auf C4-Professuren (Herr Martin ist einem Ruf nach Darmstadt gefolgt) dokumentiert.

Die Aktivitäten unseres Bereichs im Berichtszeitraum 1999 gliedern sich in folgende Schwerpunkte:

Optimierung

- Diskrete Strukturen

- Nichtlineare Optimierung
- Telekommunikation
- Ganzzahlige Optimierung
- Online-Optimierung
- Verkehr

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten
- 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 Abschnitte. Eine Einführung in die Aktivitäten der Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* findet sich in Kapitel 3.

Diskrete Strukturen. Der gewaltige Erfolg der kombinatorischen Optimierung bei der Lösung vieler drängender Probleme des täglichen Lebens ist eng mit den Fortschritten in der Erforschung der zugrundeliegenden diskreten Strukturen verbunden. Gleichzeitig hat sich die Untersuchung von diskreten Strukturen wie Graphen und Polyedern als eigenes Forschungsgebiet etabliert. Perfekte Graphen erlauben z. B. für viele kombinatorische Optimierungsprobleme effizientere Algorithmen als allgemeine Graphen. Aber wann ist ein Graph perfekt oder wie weit ist er davon entfernt, perfekt zu sein? Das finden optimaler Triangulierungen von Polyedern und Punktkonfigurationen – in Dimension zwei ein Schwerpunkt in der algorithmischen Geometrie – erfordert Kenntnisse über die Struktur des Raums aller Triangulierungen der Punktkonfiguration. Strukturell ähnliche Algorithmen für die Erzeugung von Triangulierungen spielen aber auch bei der Klassifikation von Mannigfaltigkeiten eine wesentliche Rolle. Die Beziehung zwischen der Untersuchung diskreter Strukturen und der Konstruktion von Algorithmen wird in diesem Schwerpunkt in beide Richtungen betrachtet.

Nichtlineare Optimierung. In diesem Arbeitsgebiet werden momentan zwei Klassen hochdimensionaler nichtlinearer Optimierungsprobleme untersucht. Konvexe Probleme aus der mehrstufigen stochastischen Optimierung entstehen z. B. in der Optimalen Steuerung von Destillationskolonnen; semidefinite Programme betrachten wir insbesondere im Zusammenhang mit Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme, z. B. aus der Telekommunikation. Zur Lösung kommen in beiden Fällen Innere-Punkt-Methoden zum Einsatz. Die Weiterentwicklung Spektraler Bündelverfahren für die Lösung semidefiniter Programme sowie

die Realisierung rekursiver Algorithmen zur Bearbeitung stochastischer Optimierungsprobleme gehören zu den Hauptstoßrichtungen in diesem Schwerpunkt.

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. Zu den Kooperationspartnern E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), dem Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin) sowie der Siemens AG (München) ist im vergangenen Jahr die telekom austria hinzugekommen. Die verwendeten mathematischen Methoden reichen von Schnittebenen- und Spalten-generierungsalgorithmen sowie demidefiniter Programmierung über primale und duale Heuristiken bis hin zu Verfahren, die auf Warteschlangentheorie basieren.

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.

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 u. a. 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. „Wachstum und Beschäftigung können nur gesichert werden, wenn Innovationspolitik eine Schlüsselstellung für den Standort Europa hat. Das gilt in besonderer Weise auch für den Verkehrsbereich. . . . Aus diesem Grund verknüpfen wir unsere verkehrspolitische Zielsetzung mit der Herausforderung bei Innovationen im Verkehrssektor. Eine entscheidende Rolle bei der Gestaltung eines zeitgemäßen Verkehrssystems wird die Nutzung moderner Technologien spielen. Mit Hilfe der Telematik wollen wir die Leistungsfähigkeit jedes einzelnen Verkehrsträgers steigern, die notwendige Informationsvernetzung für verkehrsträgerübergreifende Transportabläufe forcieren, eine Vernetzung der Schnittstellen sicherstellen und damit den Verkehrsfluss erhöhen.“¹

Wir versuchen in diesem Schwerpunkt, einen mathematischen Beitrag zur Optimierung der Verkehrssysteme zu leisten. Wir konzentrieren uns dabei 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.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Wesentliche Moleküldynamik

Theorie und Numerik der Konformationsdynamik

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

Kooperationspartner: M. Dellnitz, O. Junge (Universität Paderborn), Arbeitsgruppe F. Colonius (Universität Augsburg), Arbeitsgruppe P. Tavan (Universität

¹Bundesminister Reinhard Klimmt, Berlin, 22. Oktober 1999

München), F. Bornemann (Technische Universität München)

Förderung: DFG im Rahmen des SPP „Ergodentheorie, Analysis und effiziente Simulation dynamischer Systeme“, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin aus Mitteln der Europäischen Union (Ziel-2-Programm, Europäischer Fonds für regionale Entwicklung – EFRE)

Nachdem in den vergangenen Jahren der Entwurf eines völlig neuen Algorithmus zur statistischen Beschreibung der Dynamik von Konformationsänderungen molekularer Systeme gelang, lagen die Schwerpunkte im Berichtszeitraum zum einen auf der theoretischen Fundierung und Verallgemeinerung des bestehenden Konzepts [8, 10], zum anderen auf einer verbesserten algorithmischen Realisierung, welche die Anwendbarkeit auf realistische Biomoleküle teilweise erst ermöglichte [7, 6].

Im Berichtszeitraum wurde das Konzept der *dynamischen* Definition molekularer Konformationen über einen dem molekularem System assoziierbaren Transferoperator erfolgreich auf die Langevin-Dynamik übertragen [9]. Damit wurde die Anwendungsklasse von den bisher zeitdiskreten dynamischen Systemen, welchen die Hamiltonsche Dynamik zugrunde lag, auf nunmehr zeitkontinuierliche stochastische Differentialgleichungen erheblich erweitert. Die Modellierung mittels Langevin-Dynamik erlaubte zudem, die physikalisch motivierte Definition von Fastinvarianz mit einer mathematisch motivierten Definition in Beziehung zu setzen. Weiterhin konnte die Theorie der großen Abweichungen benutzt werden, um für den Grenzwert verschwindender Temperatur Aussagen über den wahrscheinlichsten Pfad zwischen verschiedenen Konformationen zu gewinnen.

Der erfolgreichen Übertragung auf die Langevin-Dynamik folgte der naheliegende Schritt einer weiteren Verallgemeinerung, um das Konzept der Identifikation fast-invarianter Mengen über spektrale Eigenschaften eines speziellen Markov-Operators auf allgemeinere Markov-Prozesse und -Ketten zu erweitern; dieses ist eine notwendige Voraussetzung zur Erschließung weiterer Anwendungsfelder.

Der zweite Schwerpunkt der Arbeitsgruppe galt der effizienten algorithmischen Realisierung; dieses ist insbesondere im Hinblick auf die Untersuchung großer Moleküldatenbanken notwendig. Hierzu wurde auch eine Anbindung an die Visualisierungssoftware AMIRA erarbeitet (siehe Virtuelles Moleküllabor). Im Zusammenarbeit mit der Abteilung Wissenschaftliche Software wurden die bisherigen MATLAB-Routinen in C++ implementiert und um eine graphische Benutzeroberfläche erweitert. Eine Modularisierung des Programmpakets erlaubte es zudem, den Identifikationsalgorithmus derart zu modifizieren, daß er sogar auf Problemstellungen aus dem Bereich *Data Mining* anwendbar wurde (siehe weiter unten).

Aus der Anwendungspraxis ergaben sich vor allem zwei Anforderungen: Zum ersten die effiziente Generierung der Daten und zum zweiten eine Dimensionsreduktion der zugrundeliegenden Markov-Kette als Voraussetzung für eine effiziente

Diskretisierung des Transferoperators. Bisher wurde letzteres durch die Reduktion auf sogenannte wesentliche Freiheitsgrade erreicht — ein Verfahren, welches auf einer Kovarianzanalyse der Freiheitsgrade beruht (nach BERENDSEN ET AL). Hier wurde zusätzlich ein, wie erste Ergebnisse zeigen, vielversprechender alternativer Weg gegangen, indem die Daten vor der Diskretisierung des Übergangsoperators grob anhand ihrer geometrischen Struktur “vorgeclustert” werden, mit dem selben Effekt einer Dimensionsreduktion (siehe Abbildung 2.1). Die Clustering basiert auf selbstorganisierenden Abbildungen (KOHONEN), die über *neuronalen Netze* realisiert werden (siehe Data Mining).

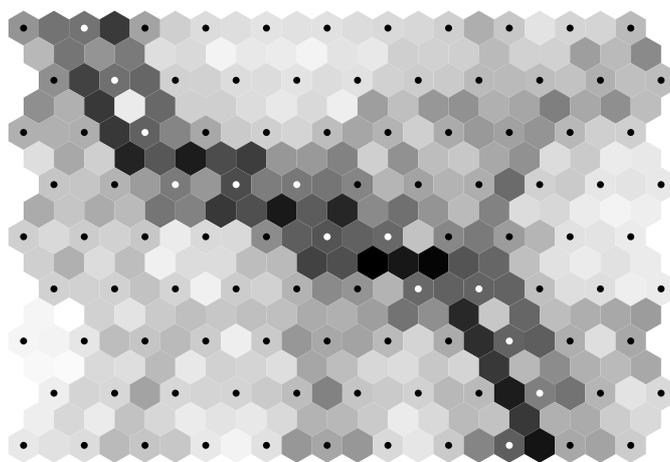


ABBILDUNG 2.1: Graphische Darstellung einer selbstorganisierten Abbildung in Anwendung auf ein kleines RNA-Molekül $r(ACC)$. Die Mittelpunkte der Hexagone repräsentieren verschiedene Zustände des Moleküls; die hellen, durch dunkle Grenzen getrennten Bereiche der Karte bilden jeweils Cluster von geometrisch ähnlichen Molekülzuständen.

Hybride Monte-Carlo-Methoden für Biomoleküle

Bearbeitet von: Alexander Fischer, Frank Cordes, Christof Schütte

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung von HMC-Methoden, die ein effizientes Abtasten des Zustandsraums von Biomolekülen ermöglichen. Im abgelaufenen Jahr gelang es, ein auf MC-Methoden aufbauendes Konzept zu entwerfen, das sich das Vorhandensein fast invarianter Mengen — die Hauptursache für eine langsame Konvergenz — algorithmisch zunutze macht. In der Uncoupling/Coupling-MC-Methode (UCMC) [3] wird auf dem Weg über geeignet erhöhte “Simulationstemperaturen” eine langsam mischende Markov-Kette durch mehrere schnell mischende Markov-Ketten ersetzt.

Im Uncoupling-Schritt wird der Zustandsraum mittels einer Cluster-Analyse [2] in seine fast invarianten Bereiche, d.h. verschiedene Konformationen des Moleküls, zerlegt. Neue Markov-Ketten werden anschließend parallel in den einzelnen

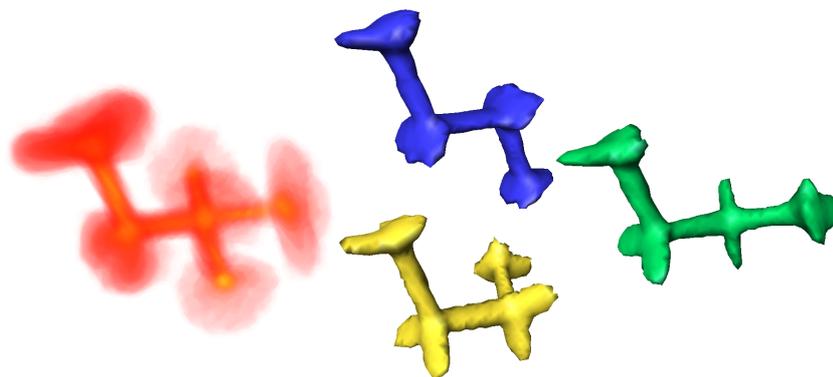


ABBILDUNG 2.2: Links: Von einer Markov-Kette erzeugte Zustandsdichte eines Butanmoleküls. Rechts: Drei Konformationen des Moleküls nach Clustering der Zustandsdichte.

Konformationen gestartet; sie sind aufgrund ihrer Einschränkung auf die jeweilige Konformation dort schnell mischend (siehe Abbildung 2.2). Mathematisch zeigt sich dies durch eine Spektralanalyse der zu den Markov-Ketten assoziierten Übergangsoperatoren [8].

Im Coupling-Schritt von UCMC müssen die getrennt abgetasteten Gebiete wieder miteinander in Verbindung gebracht werden. Dies geschieht über eine Kopplungsmatrix. Um diese in der numerischen Simulation aufstellen zu können, müssen Quotienten von Normalisierungskonstanten zwischen den einzelnen Dichten berechnet werden, die aus einer normalen Monte-Carlo-Simulation nicht zu erhalten wären. Dies wird durch die im Vorjahreszeitraum entwickelte HMC-Methode mit adaptiver Temperaturwahl (ATHMC) [4] ermöglicht. ATHMC wurde im Berichtszeitraum zu einer flexibleren Methode, Potential-Scaling-HMC (PSHMC), weiterentwickelt, mit der sich die notwendigen Skalierungen auf die wesentlichen Potentialanteile einschränken lassen. ATHMC bzw. PSHMC sind nun wichtige algorithmische Bestandteile von UCMC geworden.

Nach ersten erfolgreichen Testläufen in einer MATLAB-Umgebung wurde damit begonnen, den UCMC-Algorithmus in die integrierte Software-Plattform zur Simulation von Biomolekülen zu implementieren. Folgende Anforderungen mussten dabei speziell berücksichtigt werden:

Die Quotienten der Normalisierungskonstanten getrennt abgetasteter Dichten werden zur Aufstellung der Kopplungsmatrix und Gewichtung des Endresultats, aber auch zur Qualitätskontrolle des Samplings benötigt. Erste Simulationen an Biomolekülen haben gezeigt, daß der engen Verknüpfung von Simulation und Analyse hier eine besondere Bedeutung zukommt. Ein wichtiger Schritt in diese Richtung ist die Ortsraumdiskretisierung durch neuronale Netze (siehe weiter unten), die während der Simulation automatisch ablaufen kann.

Bei der Simulation von komplexeren Biomolekülen reicht ein Uncoupling/Coupling-Schritt nicht aus, um die strukturellen Veränderungen von der einfachen Ausgangsdichte bis hin zur physikalisch relevanten kanonischen Dichte aufzulösen. Der UCMC-Algorithmus wurde daher durch eine hierarchische Anwendung des Uncoupling/Coupling-Schrittes erweitert, um sich adaptiv der physikalischen Dichte anzunähern.

Die HMC-Simulation unabhängiger Markov-Ketten sollte an mehreren Molekülen und Konformationen parallel durchführbar sein, um eine hohe Produktionsrate für die Konformationsanalyse von Wirkstoffdatenbanken zu ermöglichen. Im Jahr 2000 wird deshalb der Algorithmus auf der Parallelarchitektur der CRAY T3E getestet werden.

Virtuelles Screening von Wirkstoffdatenbanken

Bearbeitet von: Frank Cordes, Michael Meyer und Peter Deuffhard

Kooperationspartner: L. Müller-Kuhr, G. Jas (AnalytiCon AG, Potsdam)

Förderung: AnalytiCon AG (Potsdam)

Ein wesentliches Problem bei der effizienten Entwicklung von neuen Wirkstoffen ist die gezielte Auswahl von aktiven Substanzen aus Millionen von organischen Verbindungen. Die Verfahren zum Virtuellen Screening, die am ZIB entwickelt werden, sollen die Entwicklungszeiten beträchtlich verkürzen, indem sie aus Datenbanken und kombinatorischen Molekülbibliotheken geeignete Kandidaten auf der Basis eines verfeinerten Schlüssel-Schloß-Prinzips auswählen. Aus einer Superposition der Strukturen von aktiven Analogverbindungen (Schlüssel) und aus Proteinstrukturen (Schloß) werden Pharmacophormodelle und molekulare Descriptoren abgeleitet, mit denen Datenbanken nach potentiellen Wirkstoffen durchsucht werden (siehe Abb. 2.3). Änderungen der Konformation durch die Wechselwirkung zwischen Protein und Ligand werden dabei durch die dynamische Konformationsanalyse berücksichtigt. Im Anschluß an das Datenbankscreening erfolgt das Docking zur Berechnung der Struktur des Protein Ligand Komplexes. Dieser Schritt ermöglicht ein detailliertes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen dem Wirkstoff und seinem Target auf atomarer Ebene. Daraus resultiert dann die Möglichkeit zur Wirkstoffoptimierung.

In diesem Projekt, das 1999 in Kooperation mit der AnalytiCon AG begonnen hat, wurde zunächst die Implementierung des MMFF94-Kraftfeldes vorgenommen. Hierdurch wird die Parameterisierung der Energiefunktion von Molekülen mit beliebiger Strukturformel ermöglicht, eine wichtige Vorbedingung für den Aufbau einer Moleküldatenbank, auf die Verfahren der Konformationsanalyse und des Protein - Ligand Dockings angewandt werden sollen. Mit etwa 700 Strukturen der Cambridge Datenbank wurde das Kraftfeld getestet und der erste Schritt zum Aufbau einer eigenen Moleküldatenbank durchgeführt. Die Struktur dieser Datenbank gestattet den Zugang der folgenden Anwendungen:

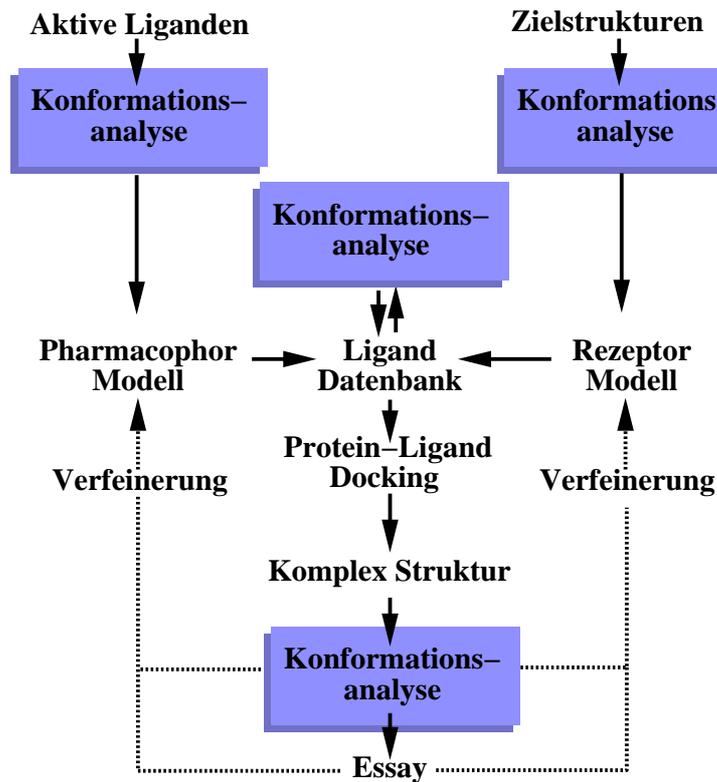


ABBILDUNG 2.3: Konformationsanalyse innerhalb des Virtuellen Screenings.

- Simulation mit Hybriden Monte Carlo Methoden
- Konformationsanalyse mit Clusteralgorithmen
- Visualisierung und Vergleich von Konformationen

Eine wesentliche Verbesserung der Clusteralgorithmen wurde durch den Einsatz von *Self-Organizing Maps* erzielt, da eine interaktive Boxdiskretisierung durch den Nutzer entfällt und die Methode somit direkt in den Simulationsbereich übertragen werden kann. Speziell erste Anwendungen auf komplexe Inhibitoren der Enzyme Neuraminidase (Grippe) und HIV-Protease (AIDS) deuten die Robustheit dieses Zugangs an.

In Zusammenarbeit mit der Abt. Visualisierung wurden auf der Basis von künstlichen Krafttermen zwischen den Atomtypen verschiedener Moleküle Verfahren zur Superposition von Zustandsmengen unterschiedlicher Moleküle entwickelt, die für die Generierung von Pharmakophormodellen eingesetzt werden können.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Data-Mining (Tobias Galliat, Peter Deuffhard, Wilhelm Huisinga, Rainer Roitzsch; Förderung: Risk-Consulting, Prof. Dr. Weyer, Köln)

Im Oktober 1999 starteten die Aktivitäten im Bereich Data-Mining. Ziel ist die Entwicklung und Anwendung effizienter Methoden zur automatischen Analyse von großen Datenmengen (Massendaten). Die Anwendungsschwerpunkte sollen dabei zum einen auf Simulationsdaten molekularer Systeme, zum anderen auf Daten aus dem Finanz- und Versicherungsbereich liegen. Für den letzteren Anwendungsbereich konnte die Firma Risk-Consulting, Prof. Dr. Weyer (Köln) als Kooperationspartner gewonnen werden. In den verbleibenden drei Monaten des Jahres 1999 sind schon erste vielversprechende Ergebnisse erzielt worden. So wurde mit den von T. KOHONEN entwickelten Self-Organizing Maps (SOMs) ein auf selbstorganisierenden neuronalen Netzen basierendes Data-Mining-Verfahren so angepaßt, dass es zur Vorclustering von Molekülkonformationen geeignet ist, die durch zyklische Torsionswinkel beschrieben sind. Aufgrund der überzeugenden Resultate wurde das Verfahren unmittelbar in die neu entwickelte Software-Plattform integriert. Des Weiteren wurde ein neuer Ansatz gefunden [6], der es ermöglicht, den bereits früher entwickelten Algorithmus zur Identifikation fast invarianter Mengen [2] in Kombination mit SOMs auch zur Identifikation von distanzbasierten Clustern zu nutzen, wodurch sich der Anwendungsbereich auf beliebige Clusteranalyse-Probleme – insbesondere also auf solche aus dem Finanz- und Versicherungsbereich – erweitert. Dies wiederum hat es zweckmäßig erscheinen lassen, die schon erwähnte Software-Plattform stärker zu modularisieren, um eine Nutzung von Teilkomponenten auch außerhalb der Moleküldynamik zu ermöglichen. Neben diesen beiden Kernaktivitäten wurde die Theorie der Nutzung von Informationsleveln, d.h. der Bewertung des Informationsgehaltes der zu analysierenden Daten, im Rahmen des Data-Mining weiterentwickelt und algorithmisch umgesetzt [5].

Identifikation dynamischer Konformationen mittels Färbung von Graphen (Alexander Fischer, Wilhelm Huisinga, Rainer Roitzsch)

Der im Vorjahreszeitraum entwickelte Algorithmus zur Identifikation dynamischer Konformationen von Biomolekülen war trotz guter Ergebnisse aus mathematischer Sicht aufgrund der verwendeten Heuristiken unbefriedigend. Daher wurde im Berichtszeitraum eine Umformulierung des Problems in die Sprache der diskreten Mathematik vorgenommen [2]. Es gelang, eine algebraische Struktur in den Simulationsdaten auszunutzen, mit der zum einen ein mengenorientierter Zugang ermöglicht und zum anderen die große Anzahl der Simulationsdaten auf einen Kernbereich eingeschränkt wurde. Der Algorithmus auf diesem Kernbereich ließ sich wiederum als Graphenfärbungsproblem formulieren, so daß nun auf ein reichhaltiges Repertoire an Färbungsalgorithmen aus der Graphentheorie zurückgegriffen werden kann. Es erfolgte eine Implementierung des Identifikationsalgorithmus in die bestehende Software-Plattform 2.2.1.

Simulationsanwendungen auf Biomoleküle (M. Meyer) In Zusammenarbeit

mit der TFH Berlin (W. Trowitzsch-Kienast) wurden neuartige Siderophore mit de novo Design Methoden entworfen, die einen effizienten Nachweis von Bakterien und einen gezielten Einsatz von Antibiotika ermöglichen. Die Substanzen enthalten völlig neue Strukturfragmente und zeichnen sich durch eine besonders hohe Aktivität in biologischen Tests aus.

Mit dem Institut für Molekulare Biotechnologie (J. Sühnel) wurden quantenchemische Untersuchungen an Nucleinsäuren zur Analyse der Struktur und der Wechselwirkungen zwischen den Basen in RNA-Tetraplexen durchgeführt. Insbesondere konnte die Stabilisierung dieser Komplexe durch Metallkationen aufgeklärt werden.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard, *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs*. In: Computational Mathematics Driven by Industrial Applications. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag (accepted).
- [2] P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, and Ch. Schütte, *Identification of almost invariant aggregates in nearly uncoupled Markov chains*, Akzeptiert in Lin. Alg. Appl., Überarbeitete Version erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup>, 1999.
- [3] A. Fischer, *Uncoupling/coupling Monte Carlo*, Vorarbeiten zu einer Dissertation.
- [4] A. Fischer, F. Cordes, and C. Schütte, *Hybrid Monte Carlo with adaptive temperature choice: efficient conformational analysis of RNA*, Comput. Phys. Comm. **121–122** (1999), 37–39.
- [5] T. Galliat, *Clustering data of different information levels*, Preprint SC 99-42, ZIB, 1999. Eingereicht für IDA2000, 1999.
- [6] T. Galliat, W. Huisinga, and P. Deuffhard, *Self-organizing maps combined with eigenmode analysis for automated cluster identification*, Preprint SC 99-38, ZIB, 1999. Akzeptiert für Neural Computation, 2000.
- [7] W. Huisinga, C. Best, R. Roitzsch, Ch. Schütte, and F. Cordes, *From simulation data to conformational ensembles: Structure and dynamic based methods*, J. Comp. Chem. **20** (1999), no. 16, 1760–1774, erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup>.
- [8] Ch. Schütte, *Conformational dynamics: Modelling, theory, algorithm, and application to biomolecules*, Habilitationsschrift, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin, 1998, erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup>.

- [9] Ch. Schütte and W. Huisinga, *On conformational dynamics induced by Langevin processes*, Preprint SC 99-25, ZIB, 1999. Erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup>, 1999.
- [10] Ch. Schütte, W. Huisinga, and P. Deuffhard, *Transfer operator approach to conformational dynamics in biomolecular systems*, Preprint SC 99-36, ZIB, 1999. Erhältlich unter <http://www.zib.de/MDGroup>, 1999.

2.2.2 Quantenklassische Moleküldynamik

Dieses Projekt greift die in nahezu allen Bereichen der Molekülphysik und Materialwissenschaft gemachten Beobachtungen auf, daß viele interessante Eigenschaften von Molekülen und molekularen Aggregaten erst bei Berücksichtigung *quantendynamischer* Prozesse korrekt beschrieben und beeinflusst werden können (z.B. Reaktionsdynamik und Protonentransfer in Biomolekülen, photoinduzierte Prozesse). Dieser Notwendigkeit steht gegenüber, daß eine *vollständig* quantenmechanische Simulation der Dynamik größerer Molekülsysteme aus Aufwandsgründen nicht möglich ist. Daher sucht man nach *gemischt quanten-klassischen* Modellen, die die Integration quantendynamischer Prozesse eines kleinen Teilsystems in eine klassische Beschreibung des größten Teils des molekularen Systems erlauben (siehe Abbildung 2.4). Dabei ist vor allem die Beschreibung der *nicht-adiabatischen* Kopplungen der hochfrequenten Quantendynamik an die langsamen "klassischen" Bewegungen entscheidend. Aber gerade die verlässliche Modellierung dieser Effekte stellt wegen der inhärenten *Mehrskaligkeit der Dynamik in Ort und Zeit* ein weitgehend ungelöstes Problem dar: Die asymptotische Analyse der schnellen Zeitskala erklärt (soweit bisher erfolgreich durchgeführt) nur die adiabatischen molekularen Prozesse; nicht-adiabatische Abweichungen von der adiabatischen Dynamik waren mit der bekannten asymptotischen Analyse und der dazugehörigen Numerik nicht (oder nur mit extremem Aufwand) zu beschreiben. Im Berichtszeitraum konnten nun vielversprechende Ansätze zur Modellierung und Numerik dieser nicht-adiabatischen Abweichungen präsentiert werden: die Ableitung einer neuen Basisgleichung für die Konstruktion neuer, algorithmisch orientierter Modelle und eine Analyse mittelnder Integratoren, die die Grundprinzipien dieser effizienten Verfahren offenlegt.

Modellierung nicht-adiabatischer Effekte

Bearbeitet von: Christof Schütte, Burkhard Schmidt, Peter Nettesheim

Kooperationspartner: Folkmar A. Bornemann (TU München)

Förderung: DFG-Schwerpunkt "Zeitabhängige Phänomene und Methoden in Quantensystemen"

Im QCMD-Modell sind die quantendynamisch beschriebenen Freiheitsgrade über eine singular gestörte Schrödingergleichung nichtlinear an die klassische Hamil-

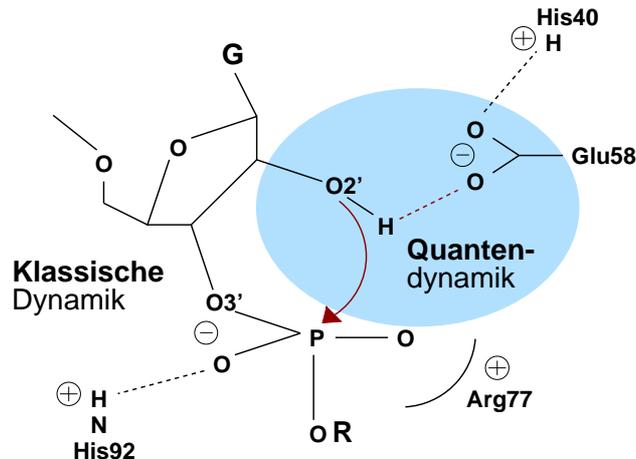


ABBILDUNG 2.4: Quanten–klassisches Anwendungsbeispiel: Katalyse einer enzymatischen Reaktion durch Ribonuklease T1.

tonsche Bewegungsgleichung der Kerne des Moleküls gekoppelt (mit dem Skalenparameter ϵ). In den vorangegangenen Jahren konnte die Arbeitsgruppe klären, unter welchen Bedingungen das QCMD-Modell die volle Quantendynamik approximiert, daß der adiabatische Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ für QCMD im kreuzungsfreien Fall die adiabatische Dynamik der vollen Quantendynamik wiedergibt und welche Effekte beim Durchlaufen von Kreuzungen zu erwarten sind. Anhand von Beispielen konnte demonstriert werden, daß an solchen Resonanzstellen eine Erweiterung des QCMD-Modells hin zu sogenannten “QCMD-Partikel-Bündeln” die Aufspaltung des Wellenpakets in verschiedene Teilpakete zu approximieren erlaubt (s. Abbildung 2.5).

Auch für die Reproduktion nicht-adiabatischer Effekte in der Nähe vermiedener Kreuzungen scheint eine statistische/stochastische Erweiterung des QCMD-Modells erfolgversprechend: die vieldiskutierten “surface-hopping” Methoden konnten erfolgreich zur Approximation der nicht-adiabatischen Effekte bei vermiedenen Kreuzungen eingesetzt werden [2]. Diese Klasse von Algorithmen erscheint extrem vielversprechend, es fehlte bisher jedoch jegliche mathematische Approximationsaussage. Zudem enthalten die Verfahren zu viele “Tuning-Parameter”. Diese Situation war darin begründet, daß keine Basisgleichung vorlag, von der die “surface-hopping” Verfahren abgeleitet werden konnten.

Wir konnten im Berichtszeitraum nun eine solche Beschreibung vorlegen [1]: Neue Entwicklungen im Umfeld der Wigner-Maße aufgreifend, wurde eine auf einer partiellen Wigner-Transformation beruhende Modellierung gefunden. Diese Modellierung erlaubt die Beschreibung des klassischen Teils des molekularen Systems mittels *Phasenraumdichten* und führt auf eine *quanten-klassische Liouville-Gleichung (QCL)* mit folgender Approximationsaussage: Die Lösung der QCL erlaubt die Approximation der vollständigen Quantendynamik bis auf einen Fehler

der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$ und enthält die nicht-adiabatischen Effekte erster Ordnung [1]. Hiermit war die Basisgleichung gefunden, mittels derer ein von uns entwickeltes, auf QCMD beruhendes “surface-hopping” als Propagation einer statistischen Gesamtheit von klassischen Partikeln mit einer durch die Quantenzustände induzierten, stochastisch beschriebenen Wechselwirkung verstanden werden konnte.

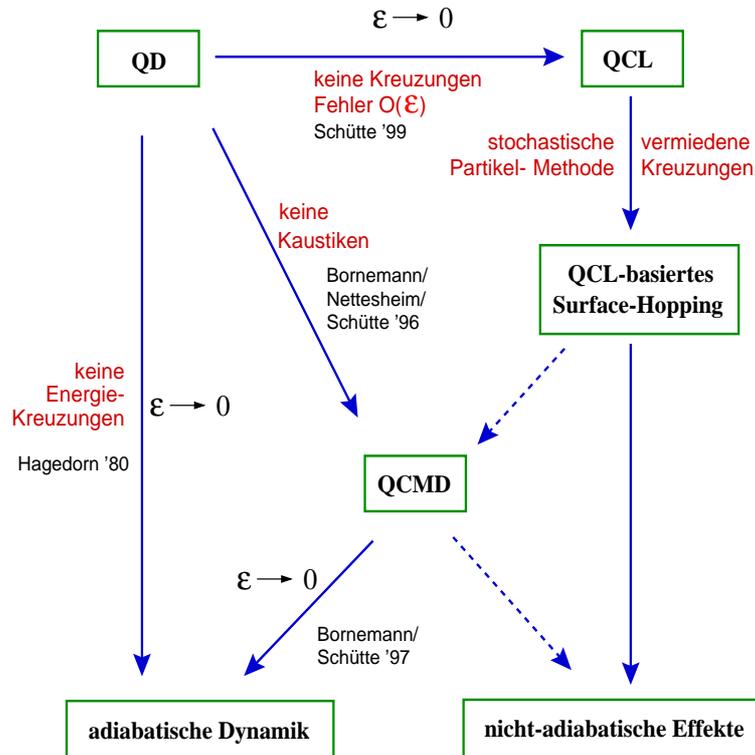


ABBILDUNG 2.5: Zusammenhang zwischen verschiedenen quantenklassischen Modellen.

Numerische Algorithmen für fast-adiabatische Dynamik

Bearbeitet von: Peter Nettesheim, Christof Schütte

Kooperationspartner: Christian Lubich (Universität Tübingen), Marlis Hochbruck (Universität Düsseldorf)

Nachdem in den letzten Jahren zur Lösung der QCMD-Bewegungsgleichungen symplektische Integratoren, “multiple-time-stepping” Diskretisierungen, die die Anzahl der “teuren” Auswertungen der Kräfte auf das klassische Teilsystem zu reduzieren erlauben, und Langschritt-Integratoren auf der Grundlage exponentieller Diskretisierungen entwickelt wurden, standen im Berichtszeitraum Verfahren für die fast-adiabatische Dynamik im Vordergrund. Insbesondere die hochoszillatorischen Phasen (proportional zu ϵ^{-1}) des quantendynamischen Teilsystems erzwingen bei herkömmlichen Algorithmen minimale Schrittweiten für kleine ϵ ,

die zu einer Aufwandsexplosion führen.

Im Rahmen der Arbeit an seiner Dissertation [3] hat P. NETTESHEIM die Übertragbarkeit der von HOCHBRUCK und LUBICH entwickelten mittelnden Langschritt-Integratoren auf den Fall der aus dem Kleinheitsparameter ϵ resultierenden schnellen Quantenoszillationen diskutiert. Dabei zeigt sich ein Zusammenhang der Mittelungsidee bei Hochbruck/Lubich mit der wohlbekannten *Averaging*-Technik nach Transformation der QCMD-Gleichungen in Normalkoordinaten. In der Normalkoordinaten-Darstellung läßt sich verstehen, welche der quantenmechanischen Größen dann für sehr kleine ϵ bei ϵ -unabhängiger Schrittweite noch verläßlich approximiert werden können. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Modellanalyse können Aussagen über die *lokale* Rekonstruktion nicht-adiabatischer Effekte in der vollständig quantenmechanischen Beschreibung durch QCMD getroffen werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Symmetrieadaption zur Komplexitätsreduktion (Burkhard Schmidt, Petra Žďánská (J. Heyrovský Institut für physikalische Chemie, Prag))

Zur Simulation der Quantendynamik realistischer Anwendungen ist die Entwicklung effizienter numerischer Algorithmen weiterhin von größter Bedeutung. Im Berichtsjahr wurde für die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit hochsymmetrischem Potential — wie bei vielen Simulationen in Clustern und Festkörpern gegeben [4, 5] — eine erhebliche Komplexitätsreduktion durch Nutzung geeigneter symmetrieadaptierter Basisfunktionen (s. Abbildung 2.6) erzielt [6]. Die gewöhnlich bei der Berechnung der Basisfunktionen auftretenden numerischen Instabilitäten für große Quantenzahlen lassen sich einerseits mittels exakter Gaussintegration und andererseits mittels eines rekursiven Algorithmus verhindern.

Quantendynamik photochemischer Assoziationsreaktionen (Burkhard Schmidt, Pavel Jungwirth (J. Heyrovský Institut für physikalische Chemie, Prag))

Als einer der einfachsten – aber dennoch bisher kaum untersuchten – photoinduzierten chemischen Elementarreaktionen kann die Bildung eines Moleküls aus zwei Atomen (Assoziation) angesehen werden. Die hier vorgelegten Ergebnisse zur Optimierung der Photoassoziations-Ausbeute [7] sollen in zukünftigen Arbeiten auf größere Systeme ausgedehnt werden, wobei sich dann der Brückenschlag zur QCMD und QCL Methodik zwanglos ergibt. (Förderung durch Schwerpunktprogramm 470 der Deutschen Forschungsgemeinschaft). Weitere umfangreiche Mittel zur Förderung der Arbeiten zur Photochemie und Photophysik (bio)molekularer Systeme konnten für die Jahre 2000 und 2001 von der Volkswagenstiftung erworben werden.

Programmpaket Nicht-adiabatische Dynamik (Burkhard Schmidt, Illia Horenko, Christian Salzmann)

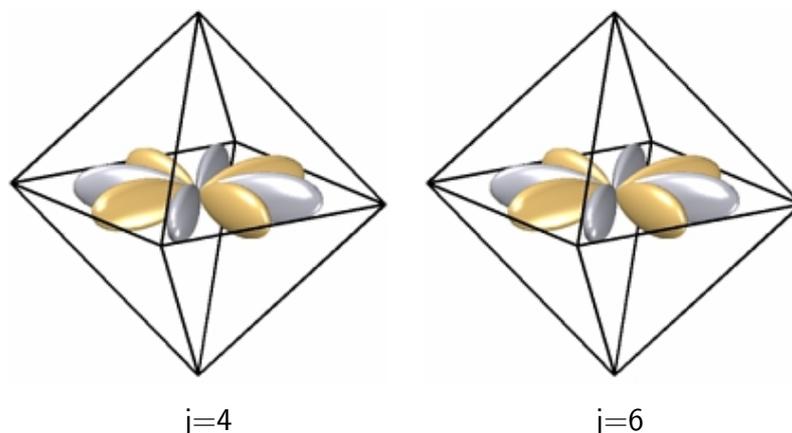


ABBILDUNG 2.6: Symmetrieadaptierte Basisfunktionen zu $j = 4$ und $j = 6$ der T_{1g} -Darstellung der oktahedrischen Punktgruppe O_h .

Im Zuge der Entwicklung neuer Modelle und Algorithmen für quanten–klassische Simulationen wurde ein Programmpaket entwickelt und implementiert, welches in modularer Weise die wesentlichen Modelle, insbesondere QCMD und QCL, enthält. Durch Nutzung neuentwickelter numerischer Verfahren lassen sich effizient Modellvergleiche in Anwendung auf realistische Systeme, beispielsweise der Wechselwirkung von Molekülen mit Laserpulsen, durchführen.

Publikationen

- [1] C. Schütte, *Partial Wigner transforms and the quantum–classical Liouville equation*, Preprint SC 99-10, ZIB, 1999.
- [2] C. Schütte, und P. Nettesheim, *Nonadiabatic Effects in Quantum-Classical Molecular Dynamics*, In: “Scientific Computing in Chemical Engineering II”, F. Keil, W. Mackens, H. Voss und J. Werther (Eds.), Springer Verlag (1999).
- [3] P. Nettesheim, *Mixed quantum–classical dynamics: A unified approach to mathematical modelling and numerical simulation*, Dissertation, Freie Universität Berlin (1999).
- [4] B. Schmidt, *Quantum Dynamics of HF Photodissociation in Icosahedral $Ar_{12}HF$ Clusters: Rotational Control of the Hydrogen Atom Cage Exit*, Chem. Phys. Lett., 301(3-4), 207-216 (1999).
- [5] P. Žďánková, B. Schmidt, und P. Jungwirth, *Photolysis of Hydrogen Chloride Embedded in the First Argon Solvation Shell: Rotational Control and Quantum Dynamics of Photofragments*, J. Chem. Phys. 110(13), 6246-6256 (1999).

- [6] B. Schmidt und P. Žďánská, *Solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation for Highly Symmetric Potentials*, Comp. Phys. Comm., im Druck (1999).
- [7] P. Backhaus, B. Schmidt, und M. Dantus, *Control of Photoassociation Yield: A Quantum Dynamical Study of the Mercury System to Explore the Role of Pulse Duration from Nanoseconds to Femtoseconds*, Chem. Phys. Lett. 306(1-2), 18-24 (1999).

2.2.3 Adaptive Multilevel Finite-Elemente-Methoden

In diesem seit vielen Jahren laufenden Schwerpunkt stand im Berichtszeitraum die wesentliche Verbesserung von kaskadischen Mehrgittermethoden für Probleme mit großen Materialsprüngen mittels Mörtel-Elementen und die Erweiterung der adaptiven Multilevel Finite-Elemente-Methoden auf die Berechnung mitbewegter Gitter im Vordergrund. Darüber hinaus wurden erste positive Resultate für eine effiziente Schrittweitensteuerung bei degenerierten Differentialgleichungen erzielt. Zwei algebraische Mehrgitterverfahren konnten für Standard Lagrange Elemente und für Kantenelemente in der Elektrotechnik entwickelt werden.

Kaskadische Mehrgittermethode bei elliptischen Problemen mit Materialsprüngen

Bearbeitet von: P. Deuffhard, B. Erdmann

Kooperationspartner: D. Braess (Ruhr-Universität Bochum), K. Lipnikov (University of Houston)

Die numerische Lösung von elliptischen Randwertproblemen mit starken Sprüngen in den Materialparametern mittels CCG-Methoden (=Cascadic Conjugate Gradient methods) führt auf unbefriedigende Resultate, weil solche Probleme strukturell eher L_2 -Probleme sind, aber das ursprüngliche CCG (DEUFLHARD 1993, BORNEMANN und DEUFLHARD 1995/6) i.w. nur H^1 -Probleme lösen kann. Vor zwei Jahren wurde deshalb von DEUFLHARD und LIPNIKOV die Anwendung von Mörtel-Elementen im Rahmen einer DD/CCG-Methode vorgeschlagen. Vorteil dieses Zugangs war die Möglichkeit, auch nichtkonforme Gitter an Grenzflächen unterschiedlicher Materialien zuzulassen. Die entstehende Hierarchie von Sattelpunktsproblemen wurde mit einem adaptiven Multilevelverfahren gelöst, dessen Glätter ein indefiniter Löser (konjugiertes Residuenverfahrenverfahren) war. Verglichen mit einer einfachen Anwendung von KASKADE bei konformen Gittern stellte sich damals heraus, daß das neue Verfahren trotz interessanter Struktureigenschaften deutlich langsamer war als das Standardprogramm.

Im Berichtszeitraum wurde dieser Zugang wesentlich verbessert. Zunächst wur-

de die ursprüngliche Gebietszerlegungsmethode (DD) ersetzt durch einen über das globale Gebiet erstreckten CCG-Ansatz. Als Glätter wurden Ideen von BRAESS/SARAZIN und BRAESS/DAHMEN aufgegriffen und geeignet modifiziert. Die Behandlung der Interface-Bedingungen bei Mörtelelementen wurde wesentlich vereinfacht (Ersetzung der exakten Lösung mittels Schur-Komplement durch wenige gedämpfte Jacobi-Iterationen). Der indefinite Glätter wurde durch einen definiten Glätter (hier vom CG-Typ) ausgetauscht, der nur im Unterraum operiert, in dem das Problem positiv definit ist; diese Eigenschaft gibt auch den Namen Unterraum-CCG-Methode (SCMG: subspace cascadic multigrid method). Die numerischen Experimente in 2D und erste in 3D belegen, daß diese Version nun in der Tat deutlich schneller ist als KASKADE, insbesondere bei grossen Materialsprüngen (Verhältnis 10^6) – siehe Tabelle 2.1 in der die Vergleichsrechnungen für ein 2D-Beispiel angegeben sind.

Darüber hinaus erlaubt der neue Zugang auch nichtkonforme Triangulierungen. In Abbildung 2.7 ist ein Vergleich der Gitter von KASKADE mit dem neuen SCMG-Verfahren dargestellt. Damit war der Weg frei für Tests bei den anspruchsvollen 3D-Problemen aus der Hyperthermie (siehe Schwerpunkt MEDIZINISCHE PLANUNGSSYSTEME), die bereits begonnen haben.

	nichtkonforme Gitter								konforme Gitter			
	DD / CCG			SCMG					KASKADE / BPX			
j	itr	N	time	itr	N	acc	time	inn	itr	N	acc	time
1	15	87	0.17	5	87	0.195	0.06	6	4	45	0.386	0.02
2	14	163	0.41	7	173	0.126	0.09	8	4	145	0.256	0.07
3	12	319	0.78	10	333	0.100	0.17	13	5	257	0.120	0.17
4	10	521	1.08	10	537	0.077	0.31	14	4	489	0.081	0.34
5	12	759	1.63	7	771	0.060	0.49	15	6	685	0.086	0.62
6	10	1021	2.33	9	939	0.053	0.72	12	4	973	0.048	1.01
7	6	1657	3.22	5	1559	0.040	1.06	12	4	1821	0.032	1.74
8	12	2717	5.47	4	2435	0.030	1.67	11	3	2477	0.031	2.77
9	6	3463	7.42	2	3455	0.025	2.51	14	3	4153	0.024	4.51
10	6	7109	12.2	2	5683	0.019	4.74	14	2	6313	0.016	7.22

Tabelle 2.1: Vergleich von drei adaptiven Multilevel Verfahren für ein Modellproblem mit großen Materialsprüngen.

Dynamische Gitter bei Partiellen Differentialgleichungen

Bearbeitet von: J. Lang

Kooperationspartner: R.D. Russell (Simon Fraser University Vancouver, B.C., Canada), W. Cao, (University of Texas, San Antonio, Texas, U.S.),

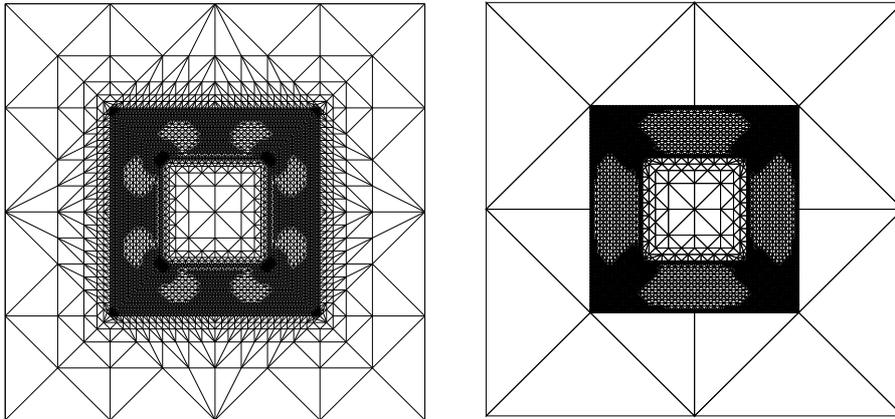


ABBILDUNG 2.7: Adaptive Gitter für KASKADE/BPX (links, konform) und für die SCMG-Methode (rechts, nicht-konform).

W. Huang, (University of Kansas, Lawrence, Kansas, U.S.)

Das adaptive Lösen von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen ist oftmals ein unverzichtbares Mittel, um zuverlässige Aussagen über das Verhalten von immer komplizierter werdenden Modellen zu bekommen. Grob gesprochen, existieren zwei grundsätzliche Methoden der Gitteranpassung: statische und dynamische. Bei der statischen Gitterverbesserung werden die Diskretisierungspunkte an festen Zeitpunkten verschoben. Dabei können Punkte hinzugenommen oder entfernt (h-Methode) oder der lokale Approximationsgrad erhöht werden (p-Methode). Im dynamischen Fall dagegen bewegen sich die Gitterpunkte kontinuierlich im Raum-Zeit-Gebiet, wobei die Bewegung durch eine sogenannte Mesh Moving PDE beschrieben wird (r-Methode). Verbindet man diese Gleichung mit Eigenschaften der zu lösenden physikalischen PDE, so läßt sich die Qualität der Lösung durch geeignete Konzentration der Gitterpunkte drastisch verbessern. Insbesondere bereitet es keine Mühe, bewegten Rändern oder inneren Fronten zu folgen. Die Methode ist gut verstanden in 1D. Hier gab es auch schon erfolgreiche Aktivitäten am ZIB (NOWAK 1993). Die große Herausforderung ist der höher-dimensionale Fall. Im Rahmen eines wissenschaftlichen Besuches an der SFU Vancouver, Kanada, wurden entscheidende Fortschritte erzielt. Ausgehend von einer Gradienten-Fluß-Gleichung, die von HUANG und RUSSELL (1997) vorgeschlagen wurde, konnten spezielle linear-implizite Zeitdiskretisierungen entwickelt werden, die eine robuste und effiziente Lösung der Bewegungsgleichungen erlauben [1]. Dabei werden übliche Schwierigkeiten, wie z.B. Singularitäten bei der Knotenbewegung oder das sogenannte Mesh Racing, vermieden.

Ein weiterer Schwerpunkt ist die Kopplung von dynamischer und statischer Methode (rh-Methode), um die Vorteile beider Methoden besser zu nutzen. Hier konnten effiziente Fehlerschätzer, die in der Habilitationsschrift von LANG (1999) entwickelt wurden, angepaßt werden. In Abbildung 2.8 ist ein typischer Vergleich von h- und r-Methode für eine Lösung mit steiler Front gegenüber einer kombinierten rh-Methode dargestellt. Während die reine dynamische Methode zu viele Knoten benötigt und die statische Methode nicht lokal genug arbeitet, liefert die rh-Methode ein nahezu optimales Ergebnis.

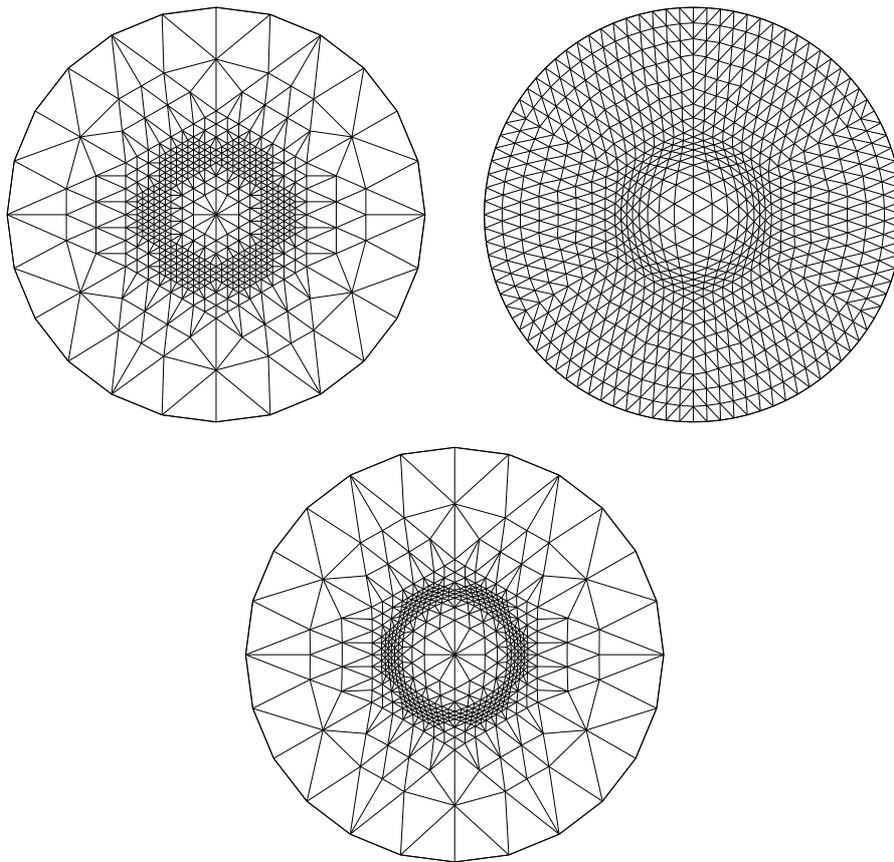


ABBILDUNG 2.8: Oben links: h-Methode mit 541 Knoten. Oben rechts: r-Methode mit 817 Knoten. Unten: hr-Methode mit 541 Knoten.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Adaptive Zeitschrittsteuerung für degenerierte parabolische Differentialgleichungen (B. Erdmann, Kooperationspartner: F.A. Bornemann (TU

München), R. Kornhuber (FU Berlin))

Degenerierte parabolische Differentialgleichungen spielen bei der numerischen Simulation von Phasenübergängen eine große Rolle. Typische Anwendungsbeispiele sind Verfestigungsprozesse in der Metallurgie. In dem vorliegenden Projekt sollen Voruntersuchungen durchgeführt werden, ob und auf welche Weise sich die Rothe-Methode als Rahmen für eine adaptive Zeitschrittkontrolle eignet. Von zentraler Bedeutung sind dabei geeignete Zeitdiskretisierungen höherer Ordnung. Im Berichtszeitraum wurden verschiedene Ansätze an Modellproblemen getestet. Erste Resultate dieser numerischen Experimente sind vielversprechend.

Graphen-basierte algebraische Mehrgitterverfahren für Lagrange-Elemente (R. Beck)

Bei vielen praktischen Problem können Standard-Mehrgitterverfahren nicht eingesetzt werden, da keine geschachtelten Triangulierungen verfügbar sind. Die Vergrößerung von unstrukturierten Gittern mittels algebraischer Methoden bietet hier eine interessante Alternative.

Es wurde eine Methode entwickelt, die zur Erzeugung von Gitterhierarchien lediglich den Graphen der System-Matrix des diskreten Problems benutzt. Besonderer Wert wird dabei auf eine günstige Verteilung der Grobgitter-Knoten gelegt, welche mit einem "advancing front"-Algorithmus plaziert werden.

Da die Größe der Matrix-Einträge bei der Vergrößerung keine Rolle spielt, wird nur die topologische Struktur des diskreten Problems ausgewertet. Bei stark anisotropen Operatoren (bzw. Materialien) ist dieses weniger effektiv. Andererseits ist der Zugang günstig für Systeme, bei denen mehrere Freiheitsgrade an den Knoten lokalisiert sind. Mit dem entwickelten Verfahren lassen sich oft Konvergenzraten erreichen, die mit denen von Standard-Mehrgitterverfahren vergleichbar sind.

Algebraische Mehrgitterverfahren für Kanten-Elemente in der Elektrodynamik (R. Beck)

Für die Diskretisierung von elektrischen und magnetischen Feldern haben sich Kanten-Elemente ("edge elements") als eine attraktive Technik etabliert. Auf Grund der geometrischen Struktur dieser Basen kann eine Gittervergrößerung nicht mit Standard-Techniken durchgeführt werden. Statt dessen wird ein Unterraum mit Hilfe einer Komponenten-Aufspaltung in Lagrange-Basen erzeugt. In diesem Raum kann nun eine rekursive Vergrößerung stattfinden. Daneben ist noch der Kern des Rotations-Operators zu berücksichtigen. Hierzu erfolgt eine zusätzliche Mehrgitter-Iteration im Potentialraum des Feldes, welcher über eine diskrete Helmholtz-Zerlegung der Felder zugänglich ist. Insgesamt ergibt sich eine geschachtelte algebraische Mehrgitter-Iteration, welche zur Vorkonditionierung eines Krylovraum-Lösers eingesetzt werden kann.

Adaptive Multilevel-Methoden für nichtlineare Probleme der optimalen Steuerung. (M. Weiser, P. Deuffhard)

Im Berichtszeitraum wurde das Konzept einer neuartigen adaptiven Multilevel-

Methode für nichtlineare Probleme der optimalen Steuerung zu einem ersten Pilot-Algorithmus entwickelt, zunächst in 1D. Ziel ist die automatische Generierung von optimalen Teiltrajektorien, die der Struktur des Problems entsprechen. Dieses Ziel wird mittels einer Innere-Punkte-Methode im Funktionenraum angegangen. Während Innere-Punkte-Methoden von verschiedenen Autoren auf bereits diskretisierte Optimalsteuerungsprobleme mit Erfolg angewendet wurden, liegen nahezu keine Arbeiten über entsprechende Ansätze für das kontinuierliche Problem im Funktionenraum vor. Da jedoch bei zunehmend feiner Diskretisierung die Struktur des kontinuierlichen Problems auch das diskretisierte Problem dominiert, scheint für das tiefere Verständnis des Verhaltens von Innere-Punkte-Methoden für Optimalsteuerungsprobleme eine Analyse des kontinuierlichen Problems erforderlich. Zudem gestattet die Orientierung am kontinuierlichen Problem eine robustere Steuerung adaptiver Algorithmen.

Dabei sind für unendlichdimensionale Optimierungsprobleme charakteristische Schwierigkeiten zu überwinden. Dazu zählt unter anderem, daß der positive Kegel in L^2 ein leeres Inneres hat und somit die Innere-Punkte-Formulierung für Zustandsbeschränkungen nicht direkt übertragbar ist. Um die Konvergenztheorie und die Implementierung des vorzuschlagenden Verfahrens in einem affin-invarianten Kontext formulieren zu können, musste zudem eine dem Problem angepaßte invariante Norm entwickelt werden.

Publikationen

- [1] D. Braess, P. Deuffhard, K. Lipnikov: A Subspace Cascadic Multigrid Method for Mortar Elements, Preprint SC 99-07, ZIB, 1999
- [2] W. Cao, W. Huang, J. Lang, R.D. Russell: On the Discretization of Moving Mesh Partial Differential Equations, in Vorbereitung
- [3] R. Beck: Graph-Based Algebraic Multigrid for Lagrange-Type Finite Elements on Simplicial Meshes, Preprint SC 99-22, ZIB, 1999
- [4] R. Beck: Algebraic Multigrid by Component Splitting for Edge Elements on Simplicial Triangulations, Preprint SC 99-40, ZIB, 1999
- [5] M. Weiser: Interior Point Type Methods for Optimal Control Problems – Vorarbeiten für eine Dissertation
- [6] R. Beck, P. Deuffhard, R. Hiptmair, R.H.W. Hoppe, B. Wohlmuth: Adaptive multilevel methods for edge element discretizations of Maxwell's equations. *Surv. Math. Ind.*, 9:271–312, 1999.
- [7] P. Deuffhard, *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs*. In: Computational

Mathematics Driven by Industrial Applications. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag (accepted).

2.2.4 Integrierte Optik

Der Schwerpunkt Integrierte Optik umfaßt alle Projekte zur Simulation integriert-optischer Komponenten und zur Signalübertragung auf optischen Nachrichtennetzen. Die im Vorgängerschwerpunkt Hochfrequente Elektrotechnik/Integrierte Optik bearbeiteten Aufgaben zur Berechnung zeitharmonischer elektromagnetischer Felder (100 MHz-Bereich) innerhalb des Hyperthermie-Sonderforschungsbereiches wurden dem Schwerpunkt Medizinische Planungssysteme zugeordnet.

Neu in das Arbeitsprogramm der Integrierten Optik aufgenommen wurden die Simulation der zeitabhängigen nichtlinearen Schrödingergleichung (Förderung durch die DFG bewilligt) und die Entwicklung von transparenten Randbedingungen für die Fresnelgleichung in zwei Raumdimensionen (Förderung durch das BMBF). Der inhaltliche Schwerpunkt der Arbeit im Berichtszeitraum lag auf der Entwicklung von transparenten Randbedingungen für die Helmholtzgleichung in zwei Raumdimensionen und deren Weitwinkel-Approximationen. Das Problem der Konstruktion transparenter Randbedingungen für beliebige rationale Weitwinkel-Approximationen der Helmholtzgleichung konnte erstmalig exakt gelöst werden.

Diskrete transparente Randbedingungen für die Helmholtzgleichung

Bearbeitet von: F. Schmidt, L. Zschiedrich

Kooperationspartner: D. Yevick, University of Waterloo, Canada

Im Projekt wurden die im Vorjahr begonnenen Arbeiten zur Konstruktion von transparenten Randbedingungen für die Helmholtzgleichung fortgeführt und um neue Problemstellungen erweitert. Im Mittelpunkt der Arbeiten stand die Entwicklung von Randbedingungen für rationale Approximationen der sogenannten Vorwärts-Helmholtzgleichung („one-way“-Gleichung). Diese Gleichung ist keine Differentialgleichung sondern eine Pseudodifferentialgleichung mit der für die physikalischen Modellierung wesentlichen Eigenschaft, daß sie Evolutionscharakter besitzt. Die Vorwärtsgleichung ist für viele Probleme das geeignete Modell und darüber hinaus numerisch viel leichter zu handhaben als die vollständige Helmholtzgleichung. Üblicherweise wird die Vorwärtsgleichung mit Hilfe rationale Approximationen in eine Folge partieller Differentialgleichungen überführt und diese Folge nach einigen Gliedern abgebrochen. So entsteht z.B. durch eine Padé (2,0) Approximation aus der Vorwärts-Helmholtzgleichung die Fresnelgleichung, die eine Gleichung vom Schrödingertyp ist. Padé (2,0) Approximation und die ursprüngliche Gleichung stehen in praktisch guter Übereinstimmung, solange die

angenommen und die tatsächliche Ausbreitungsrichtung um nicht mehr als 15° voneinander abweichen. Erhöhung der Approximationsordnung führt dazu, daß diese Abweichung größer sein darf. Im Rahmen des Projekts wurden exakte transparente Randbedingungen für beliebige rationale Approximationen der Vorwärtsgleichung entwickelt. Die bisher bekannten Randbedingungen vom Typ Padé (2,0) und (2,2) sind darin als Spezialfall enthalten. Die Konstruktion erfolgt rein numerisch, es ist keine analytische Vorbehandlung notwendig. Abbildung 2.9 zeigt die Ausbreitung zweier um 45° zur Propagationsachse, der z-Achse, geneigten Gaußstrahlen. Die Propagation erfolgt mit einem Padé (8,8) Schema, die zugehörigen transparenten Randbedingungen lassen den Strahl reflektionsfrei passieren. Die eingezeichneten Konturlinien zeigen, daß sich die Strahlen tatsächlich um 45° zur z-Achse geneigt und 90° gegeneinander gedreht ausbreiten. Die Erweiterung der Methode auf zwei Raumdimensionen ist Gegenstand eines neuen und von der DFG geförderten Projekts (Beginn 01.01.2000).

Für allgemeine Streuprobleme muß jedoch auf die vollständige Helmholtzgleichung zurückgegriffen werden. Die in den Vorjahren konzipierte und untersuchte Methodik der gekoppelten Lösung von diskreten Innenraum und diskreten Außenraumproblemen wurde weiterentwickelt. Es konnte die praktische Konvergenz der Methode auch für polygonale Rechengebiete nachgewiesen werden. Abbildung 2.10 zeigt die Konturliniendarstellung einer an einem Zylinder reflektierten ebenen Welle, wobei das Rechengebiet ein Quadrat ist. Im Gegensatz zu den üblicherweise praktisch notwendigen elliptischen Rechengebieten bietet der entwickelte Ansatz die natürliche Möglichkeit, auch über rechteckigen Gebieten zu rechnen.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Analyse der Dispersion von Integratoren für die zeitabhängige Schrödingergleichung (Lin Zschiedrich, Peter Deuffhard)

Die Dispersion und die zugehörige Gruppengeschwindigkeit sind wesentliche Struktureigenschaften der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Ein numerischer Integrator verändert die Dispersion und führt zu einer Verzerrung der Gruppengeschwindigkeit. Mittels der Analyse dieser numerischen Dispersion kann für eine große Klasse von Integratoren das Verhalten im klassischen Grenzfall verstanden werden. Es zeigt sich, daß die meisten Integratoren im klassischen Grenzfall immer kleinere Zeitschrittweiten erfordern.

Neben ihrer zentralen Bedeutung in der Quantenmechanik spielt die zeitabhängige Schrödingergleichung auch in der hochfrequenten Elektrotechnik als paraxiale Approximation an die Helmholtzgleichung eine wichtige Rolle. Da hier die Schrödingergleichung lediglich als Approximation auftritt, muß auch der Einfluß der numerischen Dispersion von Integratoren neu bewertet werden. Es zeigt sich zum Beispiel für die implizite Mittelpunktsregel, daß sie vor allem in den Bereichen des Spektrums von der Schrödingergleichung abweicht, in denen die

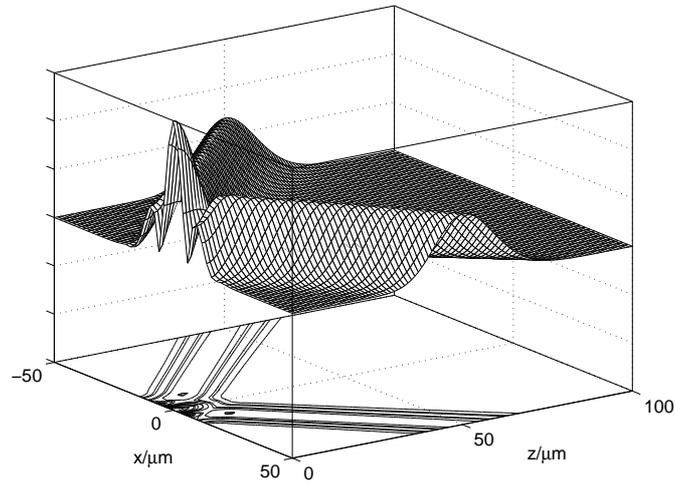


ABBILDUNG 2.9: Ausbreitung zweier jeweils um 45° zur z -Achse geneigter Gauß-Strahlen. Die transparenten Randbedingungen garantieren ein reflexionsfreies Passieren des Simulationsgebietes.

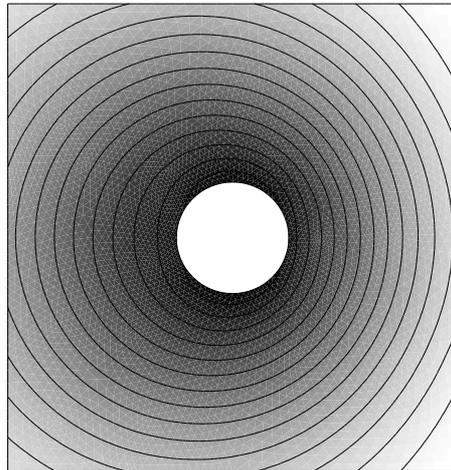


ABBILDUNG 2.10: Streuung einer ebenen Welle an einem Zylinder. Die transparenten Randbedingungen können für jedes konvexe polygonal berandete Gebiete, in diesem Fall ein Quadrat, konstruiert werden.

Approximation Schrödingergleichung an die Helmholtzgleichung schlecht wird.

Eigenlösungen von verlustbehafteten optischen Wellenleitern

(Lin Zschiedrich, Frank Schmidt, Peter Deuffhard)

Das vom BMBF geförderte und in Zusammenarbeit mit dem industriellen Kooperationspartner Dr. März, Infineon AG, München und den universitären Kooperationspartnern Dr. Friese und Prof. Yevick, Universität Waterloo, Kanada, konzipierte und entwickelte Projekt wurde weiter vorangetrieben. Der im Vorjahr entwickelte spezielle Arnoldi-Algorithmus zur Lösung des Eigenwertproblems der Maxwellschen Gleichungen für Wellenleiter wurde um eine adaptive Gittersteuerung erweitert, was nun ermöglicht, realistische Komponenten zu rechnen. Zusätzlich wurden alternative Formulierung des Eigenwertproblems getestet, die die Anwendung des hochentwickelten Arnoldi-Pakets ARPACK (Lehoucq et.al.) ermöglichen. Ein entsprechendes Programmpaket wurde unter einer grafischen Oberfläche zusammengefaßt und kann als Entwicklungswerkzeug für integriert-optische Komponenten verwenden.

Publikationen

- [1] F. Schmidt. Construction of discrete transparent boundary conditions for Schrödinger-type equations. *Surv. Math. Ind.*, (9):87–100, 1999.
- [2] T. Friese, F. Schmidt, and D. Yevick. Transparent boundary conditions for wide angle one-way Helmholtz equation. Preprint SC 99-45, ZIB, 1999.
- [3] F. Schmidt, T. Friese, and D. Yevick. Transparent boundary conditions for split-step padé approximations of the one-way Helmholtz equation. Preprint SC 99-46, ZIB, 1999.
- [4] L. Zschiedrich. Dispersion und klassischer Grenzfall von Integratoren für die zeitabhängige Schrödingergleichung. Diplomarbeit, Fachbereich Mathematik und Informatik der FU Berlin (Betreuer: Deuffhard), 1999.
- [5] T. Friese, P. Deuffhard, and F. Schmidt. A Multigrid Method for the Complex Helmholtz Eigenvalue Problem. In C.-H. Lai, P. E. Bjørstad, M. Cross, and O. B. Widlund, Editoren, *Procs. Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods in Sciences and Engineering (DD11)*, UK. DDM.org, 1999.
- [6] R. Beck, P. Deuffhard, R. Hiptmair, R. H. W. Hoppe, and B. Wohlmuth. Adaptive multilevel methods for edge element discretizations of Maxwell's equations. *Surv. Math.Ind.*, 9:271–312, 1999.

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/3D, 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. Im vergangenen Jahr konnten durch den Verkauf von Software-Lizenzen (LIMEX, KARDOS, KASKADE) an die Industrie (Linde, Dornier, UFE Solar) Mittel in beachtlicher Höhe erzielt werden.

Effiziente Simulation von Kombinationsreaktoren

Bearbeitet von: Ulrich Nowak, Aleksander Grah, Jens Lang, Peter Deuffhard,
Kooperationspartner: Roland Adler, Manfred Schreier, Thomas Hennig
(Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Universität Halle-Wittenberg)

Förderung: DFG, Projekt: "Strukturierung von Kombinationsreaktoren zur Informationsmaximierung für die Parameterschätzung in Reaktormodellen"

Langfristiges Ziel dieser Kooperation ist die Entwicklung einer numerischen Simulations- und Optimierungsumgebung für den in Halle entwickelten speziellen Kombinationsreaktor. Dieses Baukastensystem bietet aufgrund der Kombinierbarkeit von Reaktorschüssen unterschiedlicher Geometrie und Funktion vielfältige Möglichkeiten zur Untersuchung neuer Strategien zur Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse. Der Ausschnitt einer zur Zeit im Aufbau befindlichen Anlage ist in Abbildung 2.11 dargestellt.

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten zur Entwicklung eines Softwarepakets (PARAZI) zur Parameteridentifikation in Modellen von explizit und implizit gegebenen nichtlinearen Gleichungssystemen, gewöhnlichen Differentialgleichungssystemen und räumlich eindimensionalen partiellen Differentialgleichungssystemen fortgeführt. Es können nun in vereinfachten Teilmodellen der Gesamtanlage erste Untersuchungen zur Sensitivität und Identifizierbarkeit von Modellparametern vorgenommen werden. Es zeigte sich, daß, insbesondere bei moderaten Genauigkeitsanforderungen an die Simulationsverfahren, die eingeschleppten Zeit- und Ortsdiskretisierungsfehler zu Konvergenzproblemen bei dem verwendeten Parameteridentifikationsverfahren vom Gauß-Newton-Typ führen können. Zur Abmilderung dieser Probleme wurden verschiedene Techniken zur Berechnung der

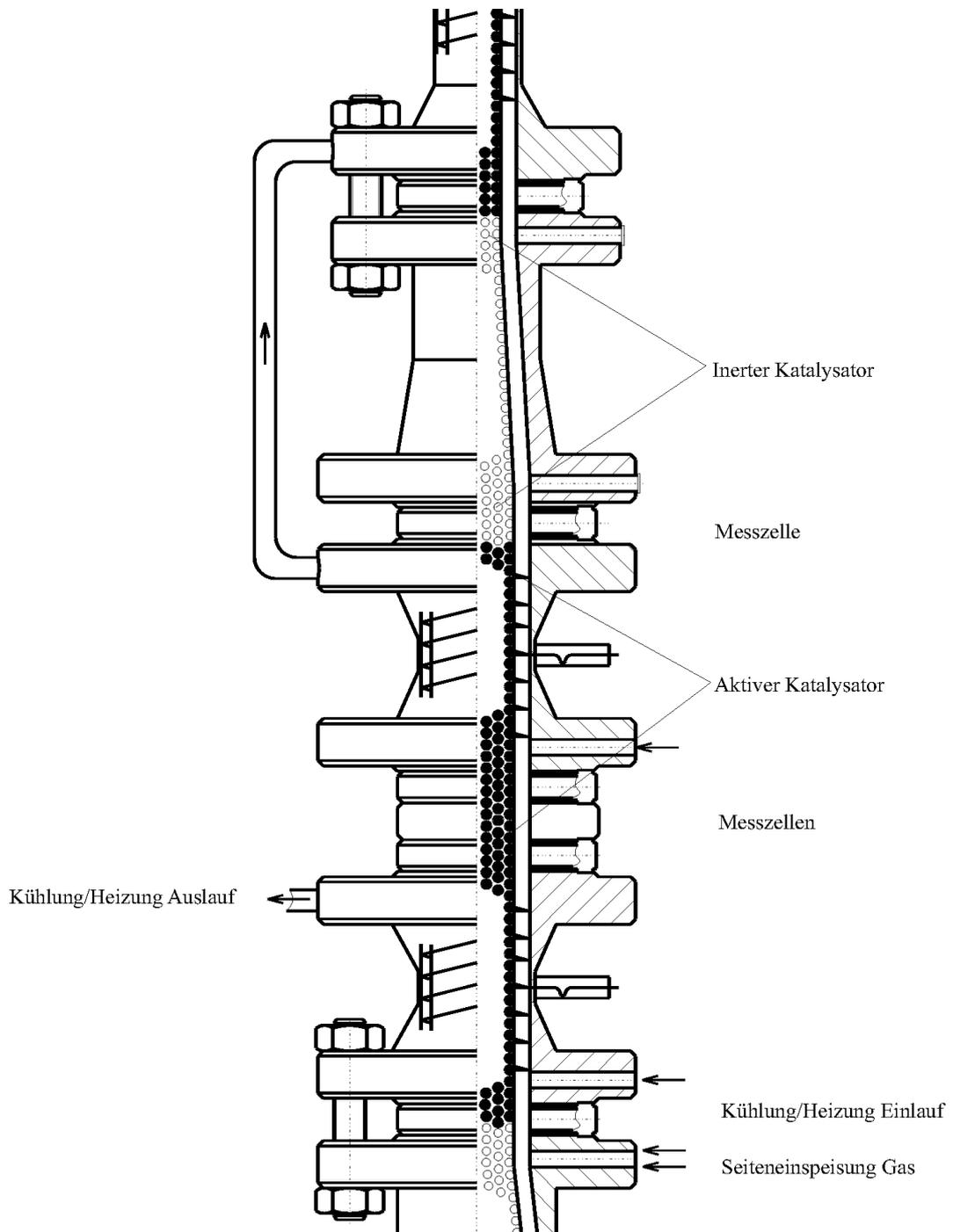


ABBILDUNG 2.11: Aufbauvariante eines Kombinationsreaktors

Sensitivitätsmatrizen implementiert und untersucht: externe numerische Differentiation auf eingefrorenen Zeit- und Ortsgittern, Lösen der Variationsgleichung auf eingefrorenen Gittern sowie interne numerische Differentiation des Zeitintegrators LIMEX. Darüber hinaus wurden erste Schritte in Richtung einer Abschätzung des Einflusses von Diskretisierungsfehlern auf die berechneten Parametern gemacht. Neben diesen Untersuchungen wurden erste Verfahren vom Linienmethodentyp für räumlich zweidimensionale Modelle entwickelt. Für spezielle Untersuchungen, wie etwa der Wärmeausbreitung in Reaktorschüssen unter Berücksichtigung der komplizierten Außengeometrie, konnte das Verfahren KARDOS-2D erfolgreich eingesetzt werden.

Aerosolsimulation

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

Kooperationspartner: Oliver Ofenloch, Karlheinz Schaber (Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Universität Karlsruhe)

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

Im Vordergrund standen im Berichtszeitraum eine Bearbeitung der Modellierung auf der Basis von Populationsbilanzen. Diese soll alle bei der Entstehung, dem Wachstum und dem Abbau von Aerosolen in technischen Anlagen relevanten Prozesse konsistent beschreiben. Weiterhin ist eine Neufassung der Modellierung im Hinblick auf die Lösungsverfahren, adaptive Finite-Element- und Galerkin-Methoden, unumgänglich. Zur numerischen Lösung der verkoppelten PDE-Systeme mit zusätzlichen Integraltermen bieten diese Verfahren ein wesentlich größeres Potential als die bisher verwendeten Linien-Methoden.

Infolge des Ausscheidens des bisher in diesem Projekt langjährig verantwortlichen Mitarbeiters des Instituts für Technische Thermodynamik und Kältetechnik und der damit verbundenen Einarbeitungsphase eines Nachfolgers geriet das Projekt eine Zeitlang in eine unvermeidliche Ruhephase.

Strukturierte Gleichungssysteme in den Anwendungen

Bearbeitet von: Karin Gatermann

Kooperationspartner: Birk Huber (Champaign, USA), Serkan Hosten (Berkeley, USA), Peter Kovacs (Technische Universität Berlin), Elmar Vogt (Freie Universität Berlin)

Im Berichtszeitraum haben wir chemische Reaktionssysteme untersucht, die als polynomielle gewöhnliche Differentialgleichungen modelliert werden. Ziel ist es, die Struktur der positiven Gleichgewichtslösungen in Abhängigkeit der Struktur des Reaktionsgraphen (Abbildung 2.12) zu verstehen.

Als Werkzeug zur Bearbeitung dieser Fragestellung verwenden wir die Newton

Polytope aus der reellen algebraischen Geometrie, die durch die Reaktionen gegeben sind. Alleinige Kenntnis der Dimension der Newton Polytope führt auf neue Einsichten.

Mit Hilfe der reellen algebraischen Geometrie lassen sich auf dem Umweg über die Newton Polytope Teile des Reaktionsgraphen identifizieren, die für die positiven Lösungen verantwortlich sind. Dadurch ergibt sich ein vertieftes Verständnis des Verzweungsverhaltens der Lösungen.

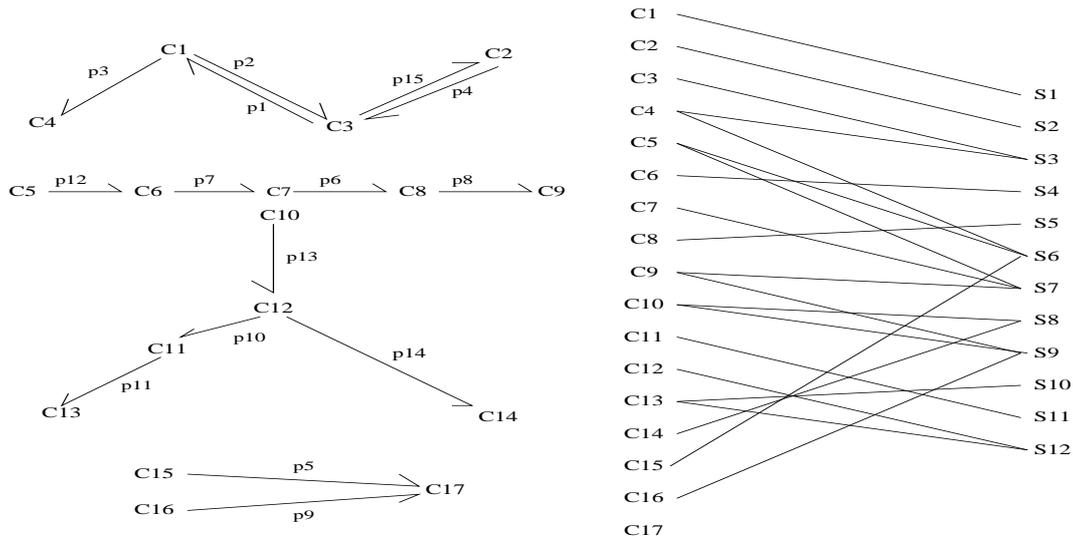


ABBILDUNG 2.12: Enzym-Synthese in einer bakteriellen Zelle nach Heinemets. Der linke Graph beschreibt die Struktur der chemischen Reaktionen und der rechte bipartite Graph die beteiligten chemischen Substanzen.

Weitere Gleichungssysteme mit einer zusätzlichen starken Struktur treten in der Robotik auf. In der Diplomarbeit [1] wurde die Symmetrie auf den Eliminationsidealen analog wie in [3] für das ganze System ausgenutzt.

Weitere dynamische Phänomene mit einer starken Struktur werden in einer zweiten Diplomarbeit behandelt, in der die chaotische Dynamik eines elastomagnetischen Bandes (siehe Abbildung 2.13) mit Hilfe von Zeitreihenanalyse untersucht wird.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Simulation des Wärmetransports in Adsorptions-Energiespeichern

(Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch, Kooperationspartner: Frank Seewald, Anja Pollei, Matthias Kraume (Institut für Verfahrenstechnik, Technische Universität Berlin), Walter Mittelbach (UFE Solar GmbH, Fraunhofer Institut für Solar-Energie-Systeme Freiburg))

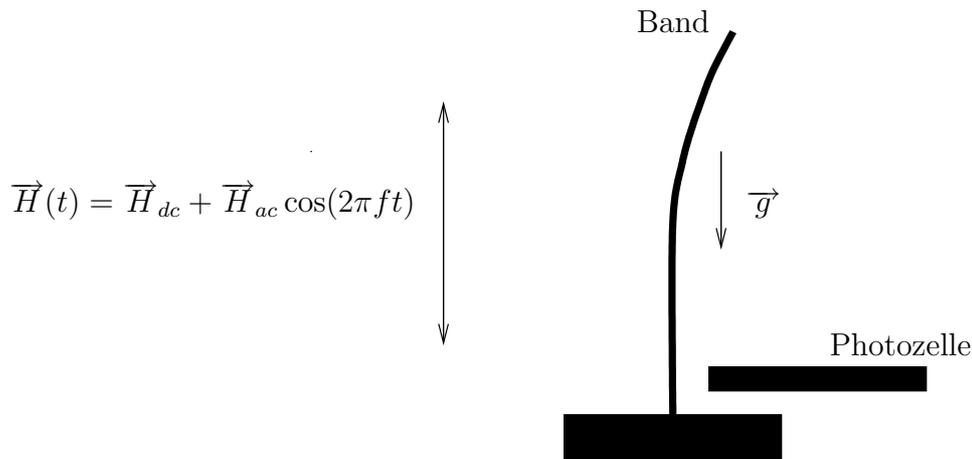


ABBILDUNG 2.13: Ein Band befindet sich in einem Magnetfeld, das periodisch schwingt. In regelmäßigen Abständen wird mit der Photozelle die chaotische Bewegung gemessen. Aus dieser Zeitreihe wird die Dynamik rekonstruiert.

Adsorptions–Energiespeicher spielen eine bedeutende Rolle bei thermischen Solarsystemen, die der Bereitstellung von Warmwasser in Gebäuden dienen. Von besonderem Interesse sind geeignete Speichertechniken mit geringem Energieverlust, die es erlauben, angesammelte Energie aus dem Sommer in den Winter zu transferieren. Im Berichtszeitraum wurden zunächst eindimensionale Modelle entwickelt, die mit Hilfe von **Kardos** an experimentelle Messungen angepaßt wurden. Diese Modelle bildeten die Grundlage für zahlreiche Simulationen, die weitere Aufschlüsse über Wirkungsweise und Effektivität von Adsorptions–Energiespeichern erbrachten.

Gravity–Kooperation (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard, Kooperationspartner: Christoph Förste, Peter Schwintzer, GeoForschungsZentrum Potsdam)

Im Rahmen eines Forschungs– und Entwicklungsvertrages mit dem GeoForschungsZentrum Potsdam wurden Algorithmen des GFZ Potsdam zur Bestimmung von Schwerefeldparametern in sehr großen Modellen des Gravitationsfelds der Erde bzgl. Effizienz und Robustheit untersucht. Im Bereich der Verfahren der linearen Algebra konnten durch Neuimplementierung der wichtigsten und zeitkritischen Routinen erhebliche Performance–Steigerungen realisiert werden (Faktor 60–100). Diese basieren auf sequentiellen und parallelen Implementierungen, die die Rechnerarchitektur optimal berücksichtigen. Bezüglich der verwendeten Methoden zur Regularisierung konnte gezeigt werden, daß ein Großteil der Parameter des Schwerefelds nur außerordentlich ungenau bestimmt werden kann.

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

Durch Modifikationen der Softwarepakete KASKADE bzw. LIMEX auf die speziellen Bedürfnisse eines Einsatzes in den Firmen Dornier (Martin Stroerer) bzw. Linde (Petra Selting) konnten Software-Lizenzen vergeben werden.

Die Kooperation mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart (Gerhart Eigenberger, Jörg Frauhammer) im Rahmen der Weiterentwicklung von PDEX1M und PDEXPACK wurde kontinuierlich fortgeführt. So wurden z.B. durch die Realisierung eines speziellen Vorkonditionierers, der auf einem problemorientierten Matrixsplitting beruht, Modelle mit Berücksichtigung des Strahlungstransports einer effizienten Behandlung zugänglich gemacht.

Publikationen

- [1] T. Albrecht, *Anwendung algebraischer Methoden auf symmetrische Probleme der Robotik*, Diplomarbeit FU Berlin, 2000.
- [2] R. Ehrig, U. Nowak: *Algorithmen- und Softwareoptimierung für die Satellitenbahn- und Schwerefeldmodellierung*, ZIB-Report 00-01, ZIB, 2000.
- [3] K. Gatermann, *Computer Algebra Methods for Equivariant Dynamical Systems*, Habilitationsschrift FU Berlin 1999, Erscheint in *Lecture Notes in Mathematics*, Vol. 1728, Springer, 2000.
- [4] K. Gatermann, B. Huber, *A family of sparse polynomial systems arising in chemical reaction systems*, Preprint SC 99-27, ZIB, 1999.
- [5] R. Ehrig, U. Nowak, L. Oeverdieck, P. Deuffhard, *Advanced Extrapolation Methods for Large Scale Differential Algebraic Problems*, in *High Performance Scientific and Engineering Computing. Lecture Notes in Computational Science and Engineering Springer Vol. 8*, H.-J. Bungartz, F. Durst, C. Zenger eds., 1999, 234–244.
- [6] F. Seewald, A. Pollei, M. Kraume, W. Mittelbach, J. Lang, *Numerical Calculation of the Heat Transfer in an Adsorption Energy Storage with KARDOS*, Preprint SC 99-04, ZIB, 1999.
- [7] R. Wankar, R. Ehrig, N.S. Chaudhari, E. Fehr, *Implementation of a Parallel Algorithm for the Symmetric Positive Definite Systems of Equations on the CRAY-T3E*, Technical Report B-17-99, Freie Universität Berlin, FB Mathematik und Informatik, 1999.

2.2.6 Medizinische Planungssysteme

Im Zentrum der Aktivitäten stand weiterhin die *regionale Hyperthermie* – ein Verfahren der Krebstherapie, bei dem Tumorgewebe durch kontrollierte Radiowelleneinstrahlung auf Temperaturen von 42 bis 44°C erwärmt wird.

Dazu trat als zweiter Schwerpunkt die *Computergestützte Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie*. Hier wird ein 3D-Planungssystem zur präoperativen Simulation chirurgischer, weichgewebeverlagernder Eingriffe entwickelt. Es beruht auf Techniken zur Erstellung anatomisch getreuer Modelle aus 3D-Bilddaten, biomechanischen Modellen des Gewebes und darauf zugeschnittenen Finite-Elemente-Verfahren. Das Vorhaben stützt sich auf Werkzeuge und Erfahrungen, die am ZIB in den letzten Jahren bei der Entwicklung von Planungssystemen für die Hyperthermie (HyperPlan, s. Abschn. 6.6) und die Epithetik [10, 11] entstanden sind, sowie auf Arbeiten zur effizienten Lösung von partiellen Differentialgleichungssystemen.

Weitere Projekte mit medizinischer Ausrichtung umfassen die virtuelle Bronchoskopie, die Analyse osteoporotischer Degenerationsprozesse sowie die 3D-Geometrie-Rekonstruktion mittels Stereo-Endoskopie.

Segmentierung dreidimensionaler biomedizinischer Bilddaten

Bearbeitet von: Thomas Lange, Natascha Westerhoff

Kooperationspartner: Jens Gustedt, Konrad Polthier (Fachbereich Mathematik, TU Berlin)

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

Im Rahmen von zwei Diplomarbeiten wurden regionen- und konturbasierte Ansätze zur Bildsegmentierung verfolgt. Bei dem *regionenbasierten Ansatz* [4] stellt jedes einzelne Voxel des Bilddatensatzes zunächst eine eigene Region dar. Benachbarte Voxel werden dann aufgrund statistischer und geometrischer Ähnlichkeitsmaße iterativ zu immer größeren Regionen zusammengefaßt. Bei dem *konturenbasierten Ansatz* (*Snake-Verfahren*) [7] ist das Ziel, eine initiale geschlossene Kontur unter Einwirkung von Kräften an den Rändern des Objektes „einschnappen“ zu lassen. Dieses schichtbasierte, also zweidimensionale Verfahren wurde durch die Einführung von dreidimensionalen Kräften, die räumliche Information beinhalten, erweitert. Zudem wurden verschiedene Verfahren zur automatischen Generierung initialer Konturen entwickelt. Beide Arbeiten wurden im Jahr 1998 begonnen und im Berichtszeitraum abgeschlossen.

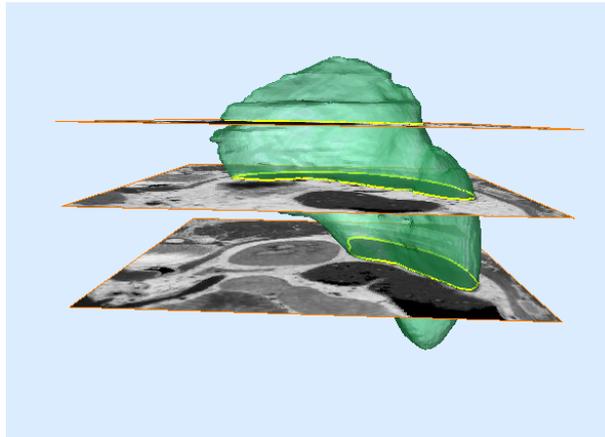


ABBILDUNG 2.14: Drei Schichten eines Bilddatensatzes, in dem die Milz segmentiert wurde. Zu sehen sind die resultierenden Konturen in den Schichten sowie die hieraus gewonnene (transparent dargestellte) Organoberfläche.

Simulation und Messung von elektrischen Feldern im Sigma-Eye-Applikator

Bearbeitet von: Rudolf Beck, Martin Seebaß

Kooperationspartner: Horst Fähling, Peter Wust (Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Jörn Berger (Fachbereich Elektrotechnik, TU Berlin)

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

Aufgrund von Simulationsstudien sind für den Sigma-Eye-Hyperthermie-Applikator der Firma BSD Medical Corp. therapeutisch günstigere Temperaturverteilungen im Patienten zu erwarten als bei dessen Vorgängermodell Sigma-60. Der Sigma-Eye-Applikator ist mit 12 Antennenpaaren ausgestattet, welche von jeweils einem Verstärker angesteuert werden. Dabei sind Amplitude und Phase jedes Kanals individuell regelbar.

Eine optimale Einstellung für die große Zahl der Regelparameter kann nicht durch Versuch und Irrtum gefunden werden. Hier sind numerische Simulationen unabdingbar, wobei im ersten Schritt die emittierten Radiowellen der Antennen zu berechnen sind. Dazu werden die Maxwell'schen Gleichungen mit einer Finite-Elemente-Methode gelöst.

Zur Überprüfung der Rechnungen wurden Meßdaten aus dem Virchow-Klinikum herangezogen. Die Messungen erfolgten mittels eines opto-elektronischen Sensors, wobei der Applikator mit einem Phantom beladen war. Abbildung 2.15 zeigt Meß- und Simulationsergebnisse für eine Komponente des elektrischen Feldes.

Die Diagramme wurden auf einer Linie vor drei mit verschiedenen Leistungen und Phasen angesteuerten Antennen aufgenommen. In diesen Bereichen treten erwartungsgemäß starke Feldvariationen auf.

Die Abweichungen zwischen Rechnungen und Messung liegen im Mittel bei 10 %; dieser Wert muß allerdings auch als Fehlerschranke für die Meßdaten angenommen werden. Ein weiteres interessantes Ergebnis systematischer Vergleiche war, daß zwischen den Kanälen des Applikators unliebsame Kopplungseffekte auftreten. Neben dem obligaten Ziel der Therapieplanung konnte damit ein wichtiger Beitrag zum technischen Verständnis der Apparatur geleistet werden.

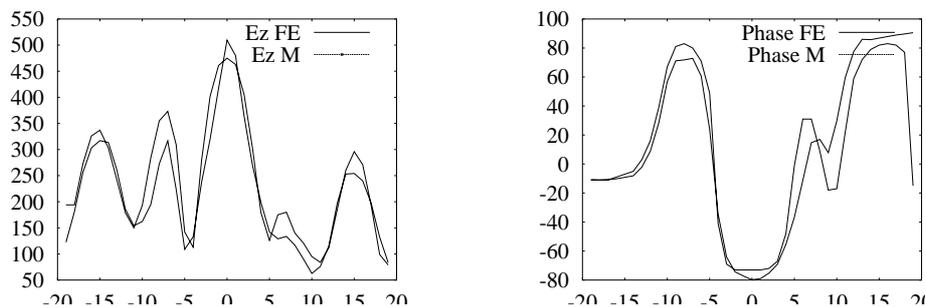


ABBILDUNG 2.15: Vergleich von Feldmessung und Finite-Elemente-Simulation im Sigma-Eye-Applikator.

Antennenentwicklung für die Hyperthermie

Bearbeitet von: Jacek Nadobny, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Lothar Westhoff, Peter Wust, Roland Felix (Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Gerhard Mönich, Waldemar Wlodarczyk (Fachbereich Elektrotechnik, TU Berlin)

Werner Hoffmann, Herbert Rinneberg (Physikalisch-Technische Bundesanstalt)

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

Im Rahmen des SFB 273 soll ein 3D-Applikator für die Tiefen-Hyperthermie im Becken- und Abdomenbereich entwickelt werden, der eine bessere Steuerung der E-Feld-Verteilung als die herkömmlichen 2D-Applikatoren erlaubt. Dieser Applikator soll Teil eines *kombinierten* Systems zur Hyperthermie und Magnetresonanz-Tomographie werden, mit dem eine effektive 3D-gesteuerte Hyperthermiebehandlung mit on-line 3D-Monitoring der Temperaturverteilung erreicht werden soll.

Es wurde ein modularer Applikator als Prototyp eines MR-kompatiblen Hyperthermie-Applikators entwickelt (siehe Abbildung 2.16). Der Entwurf wurde systematisch unter Zuhilfenahme elektromagnetischer Modellierung mit der



ABBILDUNG 2.16: Modularer MR-kompatibler Experimentalapplikator für die Tiefen-Hyperthermie im Becken- und Abdomenbereich und eines seiner zwölf Antennenmodule.

Finite-Difference-Time-Domain-Methode und in ständiger Wechselwirkung mit Experimenten durchgeführt. Als modulare Grundelemente wurden koaxial gespeiste zylindrische Dipole mit Dachkapazitätsstäben entwickelt. Sie wurden in speziell geformten wassergefüllten Kassetten plaziert. Vier solche Antennenmodule wurden zu einem in Form eines elliptischen Zylinders angeordneten Ring gruppiert. Der Applikator besteht aus drei solchen Ringen (insgesamt 12 Antennenmodule), wobei der mittlere Ring polar versetzt wurde. Der Applikator wurde hochfrequenztechnisch im Kleinsignalbereich untersucht. Dabei wurden per Netzwerkanalyse wesentliche Parameter bestimmt, wie z.B. möglichst lastunabhängige senderseitige Anpassung (< -20 dB) und geringe Kopplung zwischen den Kanälen (< -17 dB). Die numerischen Ergebnisse für diese Parameter konnten meßtechnisch für alle Entwicklungsschritte bestätigt werden [5, 8].

Computergestützte 3D Operationsplanung und Weichgewebesimulation für die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie

Bearbeitet von: Evgueni Gladiline, Stefan Zachow, Bodo Erdmann, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Klinik und Poliklinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie der Technischen Universität München,

Klinikum rechts der Isar)

Im Bereich der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie (MKG-Chirurgie) liegt ein hoher Bedarf an computergestützter Planung bei komplexen Umstellungsoperationen vor. Diese treten insbesondere bei der Korrektur angeborener Kieferform- und -lageanomalien auf (Abbildung 2.17).



ABBILDUNG 2.17: Patient mit angeborener Kieferfehlbildung (mit freundlicher Genehmigung von Dr. Dr. Zeilhofer und Dr. Dr. Sader, TUM, Klinikum rechts der Isar)

Zur konventionellen Planung komplexer Eingriffe werden derzeit aus CT-Daten generierte, physische Modelle verwendet, deren Herstellung zeitaufwendig und kostenintensiv ist. Die Planung kann hierbei lediglich im Hinblick auf die funktionelle oder symmetrische Anordnung der Knochen bzw. der Zahnstellung beurteilt werden. Ein Vergleich mit Referenzwerten und die Vorhersage der aus der Knochenumstellung resultierenden Weichgewebeanordnung inklusive der Beurteilung wesentlicher Gesichtsmimiken (Lächeln, Lachen usw.) sind derzeit *nicht* möglich.

Projektziel ist die Entwicklung eines klinisch einsetzbaren Planungs- und Simulationssystems für die MKG-Chirurgie, mit dem knochenverlagernde Operationen an „virtuellen“ 3D Schädelmodellen geplant und die daraus resultierende Weichgewebeanordnung, ggf. unter Berücksichtigung der mimischen Muskulatur, präoperativ untersucht werden können. Dadurch sollen den Chirurgen zusätzliche Bewertungskriterien für die im Hinblick auf das funktionelle und ästhetische Resultat optimale Vorgehensweise an die Hand gegeben werden.

Im Berichtszeitraum wurde der Prototyp eines solchen Systems bereitgestellt, mit dem exemplarisch Planungen an klinisch relevanten Fällen vorgenommen werden konnten. Der Prototyp basiert auf dem am ZIB entwickelten Softwaresystem AMIRA (siehe Abschnitt 2.2.7), mit dem aus medizinischen Schichtdaten qualitativ hochwertige Patientenmodelle generiert werden können. Dies beinhaltet alle

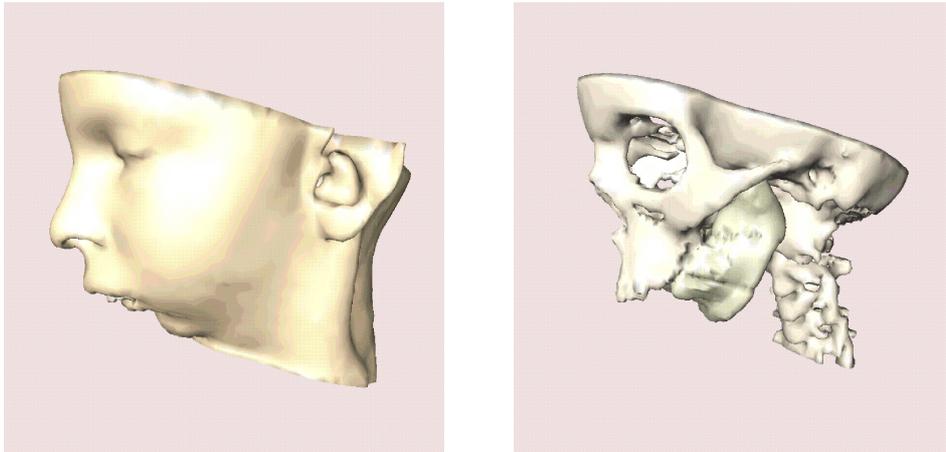


ABBILDUNG 2.18: Aus CT-Daten rekonstruiertes Patientenmodell zur 3D Planung

Schritte vom Datenimport, der automatischen Vor- und manuellen Feinsegmentierung zur Gewebeklassifikation, der Rekonstruktion eines topologisch korrekten Oberflächenmodells bis hin zur Erzeugung eines für die numerische Simulation geeigneten Volumengittermodells (Abbildung 2.18).

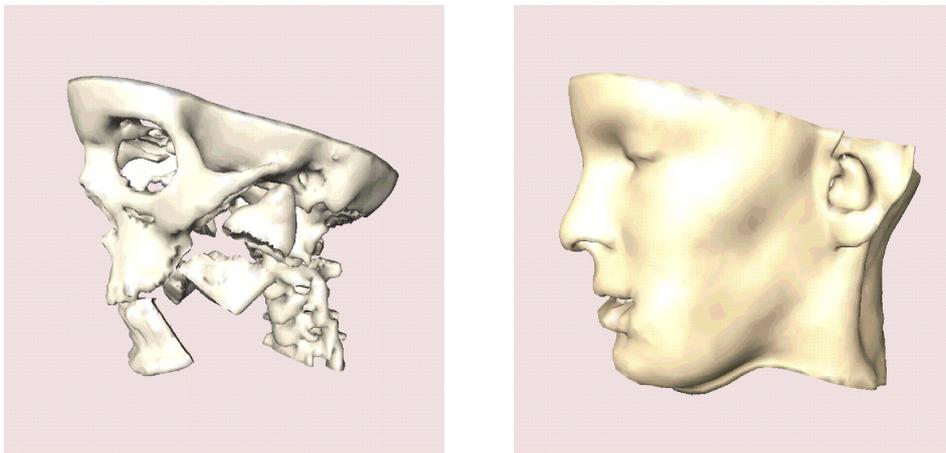


ABBILDUNG 2.19: Knochenumstellung mit simulierter Weichgewebeanordnung

Es wurden Verfahren entwickelt, die es erlauben, an dem so erzeugten Modell eine interaktive 3D Umstellungsplanung, inklusive der Zerteilung von Modellstrukturen und deren Neuordnung, vorzunehmen. Ein wesentlicher Forschungsgegenstand des Projektes ist die Entwicklung eines adäquaten physikalischen und numerischen Modells, mit dem die komplexe Mechanik biologischen Weichgewebes und dessen Verhalten unter der Einwirkung von äußeren Kräften erfaßt und

simuliert werden kann. In einer ersten Näherung wurde das Weichgewebe als ein homogenes, linear elastisches Medium aufgefaßt, dessen mechanisches Verhalten sich durch die LAMÉ-NAVIER-Gleichung beschreiben läßt. Zur numerischen Lösung des Systems gekoppelter partieller Differentialgleichungen wird das am ZIB entwickelte FEM-Programmpaket KASKADE (6.4) um spezielle Algorithmen zur Lösung elastomechanischer Probleme (Fehlerschätzer, Hindernisprobleme, u.ä.) erweitert.

In Abbildung 2.19 ist eine nach chirurgischen Vorgaben vorgenommene Umstellungsplanung und die daraus resultierende, simulierte Weichgewebearrangung verdeutlicht.

Weitere Aktivitäten

Virtuelle Bronchoskopie

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Martin Seebaß, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Jürgen Lichey (FLT Berlin Buch, Pneumologische Klinik), Vivoscopic GmbH, Berlin

Bei der Diagnostik und Therapie von Lungenleiden, speziell von Lungentumoren, spielt die Bronchoskopie eine bedeutende Rolle. Der minimalinvasive Zugang mit starren und mehr noch mit flexiblen Endoskopen über die Luftröhre gestattet es, ohne größere Risiken Gewebeproben zu entnehmen bzw. bestimmte Operationen durchzuführen. Ein Nachteil der Technik ist jedoch die durch den Tunnelblick bedingte stark eingeschränkte Positionskontrolle des Endoskops. Oft kann auch der erfahrene Operateur die genaue Lage der Endoskopspitze nur mutmaßen.

Um hier Abhilfe zu schaffen, wurden in Zusammenarbeit mit der pneumologischen Klinik in Berlin-Buch Anstrengungen unternommen, ein computergestütztes Bronchoskopiesystem mit verbesserter 3D-Navigationshilfe zu entwickeln. Auf Basis zuvor gewonnener CT-Schichtbilder wird zunächst ein 3D-Modell der Lunge des Patienten rekonstruiert. Hierfür notwendige spezielle, weitgehend automatisch arbeitende Segmentierungsverfahren wurden im Berichtszeitraum entwickelt, implementiert und erprobt. Im weiteren Projektverlauf soll das Computermodell mit Hilfe atem-getriggelter, optischer Landmarkenvermessung mit der realen Position des Patienten auf dem Operationstisch in Übereinstimmung gebracht werden. In dem so registrierten Datensatz kann dann ein mit einem 3D-Sensor ausgestattetes Endoskop lokalisiert und visualisiert werden. Als erste Anwendung soll in Zusammenarbeit mit der Firma Vivoscopic GmbH ein spektroskopisch arbeitendes System zur Tumordiagnostik realisiert werden. Eine Projektförderung über die Investitionsbank des Landes Berlin ist beantragt.

Untersuchung der Osteoporose anhand von Mikro-CT-Aufnahmen

Bearbeitet von: Johannes Schmidt-Ehrenberg, Martin Seebaß, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Dieter Felsenberg, Wolfgang Gowin (Osteoporoseforschungsgruppe, Abteilung für Radiologische Diagnostik und Nuklearmedizin, Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin)

Der menschliche Knochen hat eine poröse innere Struktur, die aus sogenannten *Trabekeln* aufgebaut ist. Diese sind entsprechend den mechanischen Belastungen, denen der Knochen ausgesetzt ist, angeordnet. *Osteoporose* ist eine Veränderung der Trabekelstruktur, die sich makroskopisch darin äußert, daß die Knochenmasse abnimmt und der Knochen an Stabilität verliert. Die mikroskopische Feinstruktur der Trabekeln kann auf verschiedene Weisen untersucht werden. Der traditionelle Weg ist die Anfertigung von histologischen Schnitten. Eine Methode, die den Knochen nicht zerstört, ist die Mikro-Computertomographie (Mikro-CT).

In Anbahnung eines Projektes zur Quantifizierung von Veränderungen der Trabekelstruktur wurden Mikro-CT-Aufnahmen von Fingerknochen mit Werkzeugen des Softwaresystems AMIRA bearbeitet. In den Schichtdaten wurde eine Segmentierung zwischen Knochen und Weichteilgewebe vorgenommen und daraus die dreidimensionale Trennfläche zwischen beiden Segmenten rekonstruiert (Abbildung 2.20), [3]. Eine Projektförderung durch die European Space Agency (ESA) ist vorgesehen, das europäische Verbundprojekt mit einer Reihe weiterer Partner soll Mitte 2000 beginnen.

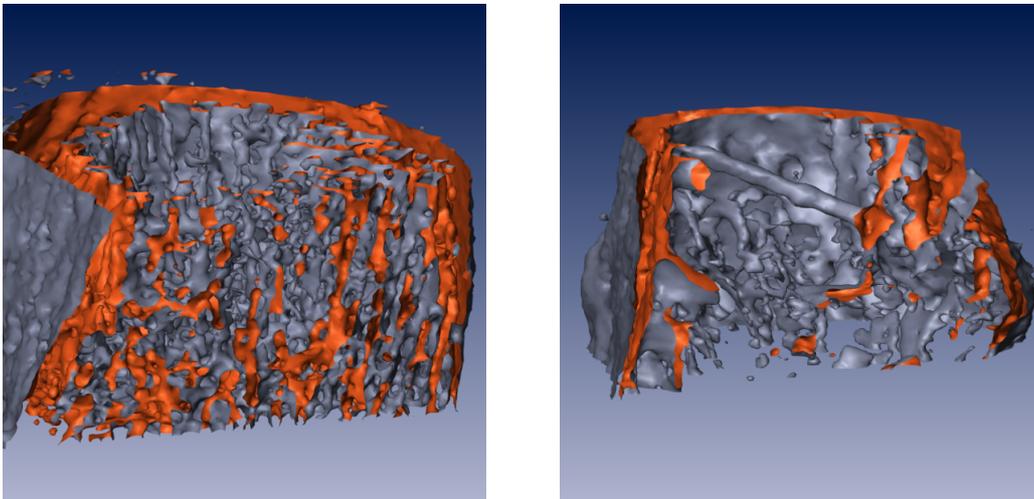


ABBILDUNG 2.20: Darstellung der Grenzfläche zwischen Knochen und Weichteilgewebe eines Fingerknochens. Links: Gesunder Knochen, rechts: osteoporotischer Knochen (Daten: Arbeitsgruppe Felsenberg/Gowin).

3D-Geometrie-Rekonstruktion mittels Stereo-Endoskopie

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Malte Zöckler, Mark Simon

Kooperationspartner: explorent Chirurgische Instrumente GmbH, Tuttlingen;
Hals-, Nasen- und Ohrenklinik der Julius-Maximilians-Universität Würzburg;
Stümed GmbH, Tuttlingen

Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines Werkzeuges zur 3D-Rekonstruktion und zur geometrischen Vermessung auf Basis von stereoskopischen Bildern.

Anhand von Stereobildern, die von zwei Kameras aufgenommen wurden, ist es prinzipiell möglich, eine 3D-Rekonstruktion und Messung durchzuführen. Entscheidend hierbei ist eine genaue Bestimmung der Kameraparameter. Dazu werden bekannte Testobjekte verwendet (siehe Abb. 2.21), anhand derer die Parameter ermittelt werden können. In der Endoskopie ermöglicht ein solches Werkzeug z.B. eine Vermessung von Knochen im Ohr und somit eine genauere Auswahl bzw. Herstellung von Cochlear-Implantaten.

Im Rahmen des Softwaresystems AMIRA wurden entsprechende Algorithmen implementiert und erste Kalibrierungen an Stereo-Endoskopen durchgeführt. Im weiteren sollen Verfahren entwickelt werden, die die spezifischen Bedingungen in der Endoskopie berücksichtigen und den hohen Genauigkeitsanforderungen in der Prothetik genügen. Mit der HNO-Klinik der Universität Würzburg wurde vereinbart, ein gemeinsames DFG-Projekt zu beantragen.

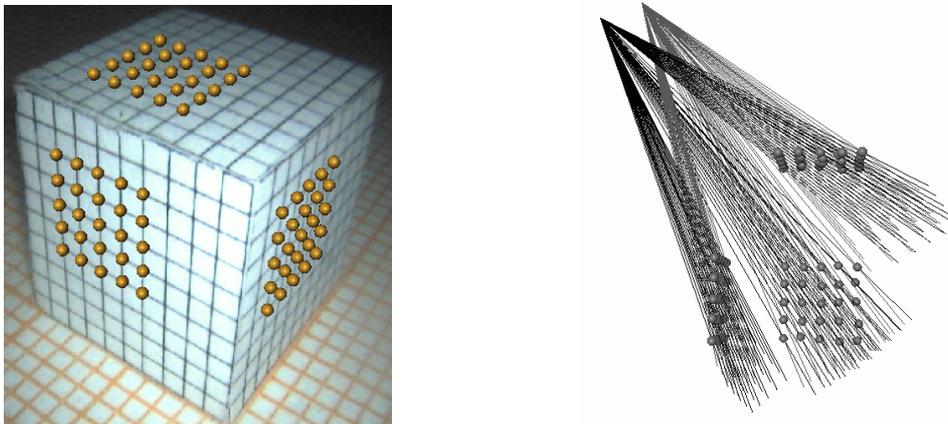


ABBILDUNG 2.21: Links: mit einem Stereo-Endoskop zu Kalibrierungszwecken aufgenommenes Testobjekt; die Marker auf den drei sichtbaren Seitenflächen entsprechen Kalibrierungspunkten. Rechts: Rekonstruktion der räumlichen Lage der Punkte anhand der Projektionslinien beider Kameras.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard, *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs*. In: Computational Mathematics Driven by Industrial Applications. Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag (accepted).
- [2] Johanna Gellermann, Peter Wust, Detlev Stalling, Martin Seebass, Jacek Nadobny, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, Roland Felix, *Clinical evaluation and verification of the hyperthermia treatment planning system HyperPlan*, Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys., accepted for publication, 1999.
- [3] M. Giehl, W. Gowin, K. Engelke, M. Karolczak, H.-C. Hege, J. Schmidt-Ehrenberg, D. Felsenberg, *Mikro-CT zur Darstellung kontrastgebender Strukturen im Weichteilgewebe*, Abstract, eingereicht zum 81. Deutscher Röntgenkongreß – Wiesbaden, Mai 2000.
- [4] Thomas Lange, *Regionenbasierte Segmentierungsverfahren für dreidimensionale biomedizinische Bilddaten*, Diplomarbeit an der TU Berlin, Fachbereich Mathematik, in Kooperation mit dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1999.
- [5] Jacek Nadobny, Waldemar Wlodarczyk, Peter Wust, Gerhard Mönich, Peter Deuffhard und Roland Felix, *3D phased array applicator for hyperthermia treatment in pelvis*, Proc. XXVIth General Assembly of International Union of Radio Science (URSI), August, 13-21, 1999, Toronto, Ontario, Canada
- [6] Detlev Stalling, Martin Seebass, Stefan Zachow, *Mehrschichtige Oberflächenmodelle zur computergestützten Planung in der Chirurgie*, in *Bildverarbeitung für die Medizin 1999 - Algorithmen, Systeme, Anwendungen*, Evers, Glombitza, Lehmann, Meinzer (Hrsg.), Springer-Verlag, Berlin, 1999, S. 203–207.
- [7] Natascha Westerhoff, *Geometrische Methoden zur 3D-Segmentierung*, Diplomarbeit an der TU Berlin, Fachbereich Mathematik, in Kooperation mit dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1999.
- [8] Waldemar Wlodarczyk, Jacek Nadobny, Peter Wust, Gerhard Mönich, Peter Deuffhard und Roland Felix *Systematic design of antennas for cylindrical 3D phased array hyperthermia applicator*, Proc. 1999 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium, July 11-16 1999, Orlando, FL, USA
- [9] Peter Wust, Jacek Nadobny, Martin Seebass, Detlev Stalling, Johanna Gellermann, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, Roland Felix, *Influence of patient models and numerical methods on predicted power deposition patterns*, Int. J. Hyperthermia 15, 1999, pp. 519-540.

- [10] Stefan Zachow, *Entwurf und Implementierung eines chirurgischen Planungssystems für den Einsatz in der Epithetik*, Diplomarbeit an der TU-Berlin, Fachbereich Informatik, in Kooperation mit der Charité Berlin, Campus Virchow Klinikum, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 1999, <http://www.zib.de/Visual/papers/cas/cas-epithetik.pdf>.
- [11] Stefan Zachow, Tim C. Lueth, Detlev Stalling, Andreas Hein, Martin Klein und Horst Menneking, *Optimized Arrangement of Osseointegrated Implants: A Surgical Planning System for the Fixation of Facial Prostheses*, in *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS'99)*, Lemke, Vannier, Inamura, Farman (Hrsg.), Elsevier Science B.V., 1999, pp. 942–946.

2.2.7 Virtuelle Labore

Simulationen und Visualisierungen ergänzen heute Theorie und Experiment. Ein Zusammenspiel der verschiedenen Arbeitsweisen wurde durch integrierte Arbeitsumgebungen, sogenannte „Virtuelle Labore“, ermöglicht. Das übergreifende Ziel der nachfolgend angeführten Projekte ist die Entwicklung von rechnergestützten Arbeitsumgebungen, in denen vielfältige Funktionen zur Bildverarbeitung, geometrischen Modellierung, numerischen Simulation, Datenvisualisierung wie auch für anwendungsspezifische Aufgaben integriert sind.

Amira – Softwareplattform für virtuelle Labore

Bearbeitet von: Detlev Stalling, Malte Zöckler, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Indeed - Visual Concepts GmbH, Berlin, Template Graphics Software (TGS), San Diego (CA), USA

Bei der Entwicklung von virtuellen Laboren für die Bereiche Medizin, Biologie, Biochemie, Chemie und Physik nutzen wir eine gemeinsame Softwareplattform, das 3D-Visualisierungssystem AMIRA. Ursprünglich als Planungssystem für medizinische Anwendungen konzipiert (vgl. Abschnitt 2.2.6), wurde es im Laufe der Zeit verallgemeinert und stark erweitert, so daß es heute eine ausgezeichnete Grundlage auch für anders gelagerte Forschungsprojekte und Anwendungen darstellt.

Der Erfolg von AMIRA beruht zu einem Großteil auf der hohen Flexibilität des Systems, die durch ein vollständig objekt-orientiertes Systemdesign erreicht wird. Neue Datentypen sowie auf diesen operierende Algorithmen können ebenso beliebig hinzugefügt werden, wie Visualisierungsmethoden oder Werkzeuge zur interaktiven Bearbeitung von Datenobjekten. In seiner Grundversion kann das System zwei- und dreidimensionale Bilddatensätze, triangulierte Flächen, Finite-Elemente-Netze, zugehörige Skalar- und Vektorfelder, sowie eine Reihe weitere

Datenobjekte verarbeiten. Mit über 100 verschiedenen Modulen können diese Datenobjekte visualisiert, verändert und weiterverarbeitet werden [2]. Hierbei kommen modernste Algorithmen zum Einsatz. Die Rekonstruktion polygonaler Modelle aus 3D-Bilddaten bildet eine besondere Stärke von AMIRA. Entsprechende Werkzeuge zur Bilddatensegmentierung und Gittererzeugung wurden im Berichtszeitraum verbessert und optimiert.

Mit zunehmendem Interesse externer Einrichtungen an AMIRA stiegen die Anforderungen: erwartet wurde eine stabile, funktional komplette, einfach zu bedienende, vollständig dokumentierte und auf unterschiedlichen Plattformen lauffähige Software, die in möglichst allen Aspekten professionellen Ansprüchen genügt. Daneben entstand umfangreicher Support- und Beratungsbedarf; außerdem wurde die Softwarepflege des permanent wachsenden Systems immer aufwendiger. Neben die Forschungsaufgaben traten dadurch immer mehr wissenschaftsfremde Aufgaben. Dies war der Anlaß, das System ab Mitte 1999 auf kommerzieller Basis weiterzuentwickeln. Dazu wurde von ZIB-Mitarbeitern die Spinoff-Firma *Indeed – Visual Concepts GmbH* gegründet und ein Kooperationsvertrag mit dem ZIB geschlossen. Die Idee der Zusammenarbeit ist, daß die Firma AMIRA zu einem kommerziellen Produkt weiterentwickelt sowie alle damit zusammenhängenden Wartungsverpflichtungen übernimmt, während sich das ZIB auf Forschungsprojekte konzentrieren kann, gleichzeitig aber von der Weiterentwicklung der Software zu einem professionellen Produkt profitiert.

Ein erstes Beispiel einer solchen Weiterentwicklung war die Portierung der Software auf das Windows-Betriebssystem, die im Januar 2000 abgeschlossen wurde. In diesem Zusammenhang wurde die Software nochmals einer intensiven Überarbeitung unterzogen. Vorversionen der Windows-Version wurden bereits im Jahr 1999 auf der SIGGRAPH-Konferenz in Los Angeles (CA) und der Supercomputing '99 in Portland (OR) demonstriert sowie bei Projektpartnern des ZIB produktiv eingesetzt.

Da AMIRA nur einen Nischenmarkt bedient – auch noch in Konkurrenz mit etablierten Produkten, war von vornherein klar, daß es weltweit vertrieben werden muß. Indeed – Visual Concepts wählte Template Graphics Systems (TGS), eine amerikanische Firma mit weltweitem Vertriebsnetz und Erfahrung im Vertrieb von Grafiksoftware als Vertriebspartner.

Schon jetzt ist offenkundig, daß die Verfügbarkeit einer professionellen Software-Plattform allen Forschungsprojekten im Bereich der Visualisierung und Bildverarbeitung zugute kommt und die Konkurrenzfähigkeit des ZIB, z.B. im Wettbewerb um Drittmittel, stärkt.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Malte Zöckler, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Randolf Menzel und Robert Brandt (AG Neurobiolo-

gie, Institut für Tierphysiologie, FU Berlin), Martin Heisenberg und Karlheinz Rein (AG Genetik, Biozentrum, Universität Würzburg), Klaus Obermayer und Michael Scholz (Fachgebiet Neuronale Informationsverarbeitung, Institut für Kommunikations- und Softwaretechnik, TU Berlin), 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 BMBF-Verbundprojektes ist die Erforschung anatomischer neuronaler Systeme. Dabei werden einerseits makroskopische Strukturen bezüglich ihrer funktionellen und anatomischen Eigenschaften untersucht, andererseits auch Untersuchungen auf dem Niveau einzelner Neuronen durchgeführt.

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 jedoch die Integration aller Einzelkomponenten zur Datenverarbeitung, Visualisierung und Datenanalyse in ein einheitliches Gesamtsystem – ein virtuelles Neuroanatomielabor. Als Software-Plattform wird das zuvor beschriebene Visualisierungssystem AMIRA verwendet.

Der Schwerpunkt der Arbeiten lag in diesem Jahr auf der Untersuchung der anatomischen Variabilität im Insektengehirn und dem anatomischen Vergleich unterschiedlicher Individuen. Nachdem Methoden zur vergleichenden Untersuchung und Standardbildung an Einzelstrukturen (am Beispiel von optischen Loben der *Drosophila melanogaster*) in [10] vorgestellt wurden, sind nun in Zusammenarbeit mit der AG Heisenberg vollständige Gehirne der *Drosophila* untersucht worden. Diese wurden mit einem konfokalen Mikroskop dreidimensional aufgenommen. Das Bildvolumen wurde dann mit den in Amira bereitgestellten Werkzeugen segmentiert, also in ca. 20 anatomisch bekannte Teilstrukturen zerlegt. Aus der Segmentierung konnten dann geometrische Modelle erzeugt werden.

Um diese Modelle vergleichen und signifikante Aussagen über die Anatomie machen zu können, mußten drei Teilprobleme bearbeitet werden:

1. Transformation in ein gemeinsames Koordinatensystem
2. Definition quantitativer Maße auf diesen Modellen
3. Graphische Analyse und statistische Auswertung der Daten.

Zur Transformation der individuellen Datensätze in ein Referenz-Koordinaten-

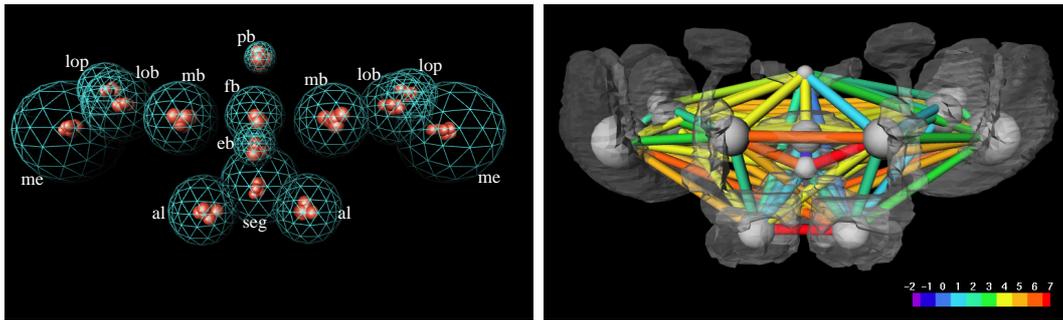


ABBILDUNG 2.22: *Links*: Darstellung der anatomischen Einzelstrukturen als Gitterkugeln, Volumen proportional zum Volumen der echten Struktur. Im Inneren sind die Schwerpunkte der Strukturen von neun verschiedenen Tieren gezeigt (visuelle Analyse der Streuung). *Rechts*: Transparentes Referenzmodell mit Darstellung des Abstandsgraphen. Farbkodiert ist die Differenz der durchschnittlichen Kantenlängen zwischen einer Gruppe von weiblichen und männlichen Tieren, die fast durchgängig positiv ist (Weibchen haben die größeren Gehirne).

system wurden verschiedene Ansätze verglichen: Maximierung einer intensitätsbasierten Korrelationsfunktion, Maximierung einer label- d.h. segmentierungs-basierten Korrelationsfunktion, landmarkenbasierte Verfahren auf Basis von manuell gesetzten Landmarken und von Schwerpunkten einzelner Teilstrukturen. Zur quantitativen Bestimmung der Ähnlichkeit bzw. des „Abstandes“ zweier Gehirne voneinander wurde ein Graph definiert (vgl. Abb. 2.22), dessen Kanten die Schwerpunkte der einzeln segmentierten Teilstrukturen miteinander verbindet. Auf diesen Graphen kann man dann Maße definieren, die die Variabilität der Lage der einzelnen Teilstrukturen zueinander mißt, bzw. einen Vergleich verschiedener Gruppen durchführen. Exemplarisch wurden männliche und weibliche Fliegen miteinander verglichen [11, 12, 13].

In enger Kooperation mit der AG Menzel wurden auch neue Resultate im Bereich der anatomischen Analyse von Bienegehirnen erzielt [6].

Virtuelles Molekül-Labor

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

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

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin aus Mitteln der Europäischen Union (Ziel-2-Programm, Europäischer Fonds für regionale Entwicklung – EFRE)

Zum Verständnis von biochemischen Prozessen müssen Struktur und Dynamik

von Biomolekülen aller Größen untersucht werden. Im Verlauf solcher Untersuchungen fallen beträchtliche Datenmengen an, die sich nur mit Hilfe von Visualisierung verstehen lassen. Im Rahmen dieses Projektes sollen neue Visualisierungs- und Analysemethoden entwickelt und implementiert werden, die eine Untersuchung von Biomolekülen erleichtern und beschleunigen.

DATENHALTUNG. Das im letzten Jahr eingeführte Datenformat wurde im Hinblick auf das Untersuchen von Molekülklassen und das Anlegen von Moleküldatenbanken weiterentwickelt. So können nun häufig wiederkehrende Daten, wie etwa Parameter des verwendeten Kraftfeldes oder Struktur des Moleküls, in einer gesonderten Datei abgelegt werden, die dann mittels eines Verweises in die Moleküldatei eingebunden wird. Weiterhin erlaubt das Datenformat, mehrere Molekültrajektorien in einer Datei zusammenzufassen, um beispielweise verschiedene Simulationen, die zur Analyse eines Moleküls beitragen, zu verknüpfen.

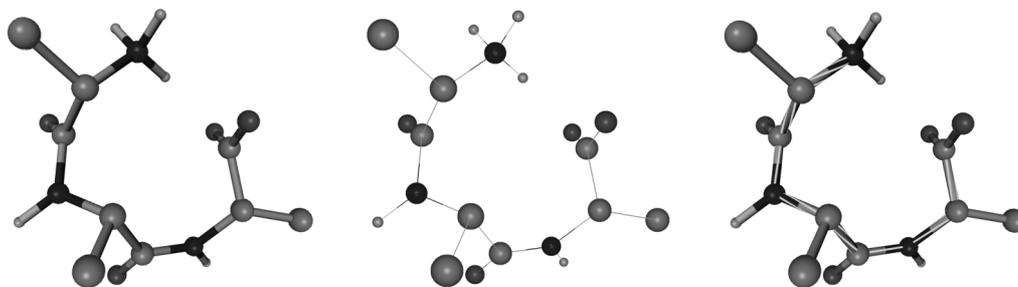


ABBILDUNG 2.23: Ball-and-Stick Darstellungen eines Peptids. *Links:* Darstellung durch Zylinder und Kugeln. *Mitte:* Darstellung der Bindungen durch Linien und der Kugeln mittels Texturen. *Rechts:* Darstellung der Dihedralwinkel durch Spiralen.

MOLEKÜLVISUALISIERUNG. Das Modul für Ball-and-Stick-Darstellungen wurde erweitert so daß sich auch große Moleküle interaktiv darstellen lassen. Für die Bindungen werden hier Linien statt Zylinder gezeigt und für die Atome senkrecht zur Sichtlinie platzierte quadratische Texturen mit dem Bild einer Kugel (Abb. 2.23, Mitte). Werden die Bindungen durch Zylinder repräsentiert, besteht nun auch die Möglichkeit Dihedralwinkel oder -differenzen durch Spiralmuster darzustellen (Abbildung 2.23, rechts).

In der Praxis werden komplexe Moleküle oftmals in der besonders schnellen Wireframe-Darstellung gezeigt. Bei dieser ist die Molekülstruktur jedoch nur schwer erfassbar. Es wurde daher eine alternative Darstellung entwickelt, die auch auf einfachen Grafikrechnern interaktive Bildraten erlaubt, gleichzeitig aber einen leichteren visuellen Zugang zur Struktur des Moleküls gestattet. In dieser Darstellung werden Bindungswinkel als Dreiecke gezeigt (Abbildung 2.24). Durch

die flächenhafte Darstellung werden Teile des Moleküls verdeckt, was dem Benutzer hilft, die dreidimensionale Struktur zu erfassen. Einen weiteren Vorteil bieten Muster, die sich leicht funktionellen Gruppen zuordnen lassen und damit ein schnelles Auffinden dieser Gruppen ermöglichen.

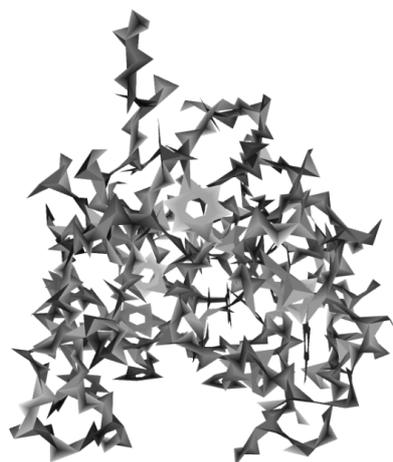


ABBILDUNG 2.24: Bindungswinkel-darstellung der Ribonuklease T1.

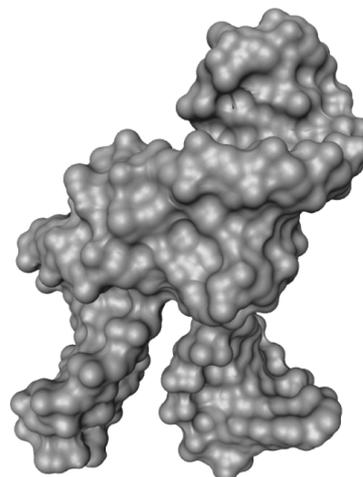


ABBILDUNG 2.25: Solvent Excluded Surface eines RNA-Moleküls.

MOLEKÜLOBERFLÄCHEN. Oberflächendarstellungen von Molekülen spielen in Anwendungen eine wichtige Rolle. Im Gegensatz zu Wireframe-Darstellungen repräsentieren sie die räumliche Ausdehnung der Moleküle. Außerdem können auf den Oberflächen skalare Eigenschaften, wie z.B. elektrostatisches Potential oder Hydrophobizität, farblich kodiert werden. Im Rahmen einer Diplomarbeit [14] wurde, neben Verfahren zur Erzeugung und Darstellung von van-der-Waals-Oberflächen sowie Solvent Accessible Surfaces, ein Verfahren zur diskreten Approximation der sogenannten Solvent Excluded Surfaces entwickelt (Abbildung 2.25). Dies ist die Fläche, die Lösungsmittelmoleküle vom betrachteten Molekül, trennt, d.h. an der sich die Wechselwirkungen zwischen Molekül und umgebendem Lösungsmittel überwiegend abspielen.

KONFORMATIONSANALYSE. Ziel von Moleküldynamiksimulationen und anschließender Strukturanalyse ist es, die bevorzugten Strukturen, die ein Molekül ausbilden kann, zu finden (siehe 2.2.1). Um die Unterschiede in den Strukturen schnell erfassen zu können, wurde ein Superpositionsverfahren implementiert, das zwei Strukturen anhand korrespondierender Atome optimal aneinander ausrichtet. Die Anwendung des Verfahrens ist auch notwendig, um bei der Animation von Molekültrajektorien Konformationsänderungen sichtbar zu machen.

Um die Flexibilität bzw. Starrheit von Molekülkomponenten visuell zu verdeutlichen, wurde ein Modul entwickelt, das aus einer gegebenen Molekültrajektorie die



ABBILDUNG 2.26: *Links:* Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Bi-Nukleotids sowie Ball-and-Stick-Darstellung zu einem Zeitschritt. *Rechts:* Zwei Konformationen des Butans. Dargestellt sind Isodichten der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für beide Konformationen. Die eingeblendete Ball-and-Stick-Darstellung zeigt einen Repräsentanten der dunkel dargestellten Konformation.

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der geometrischen Primitive (etwa Kugeln und Zylinder) berechnet, die das Molekül repräsentieren. Dabei wird das Molekül für jeden Zeitschritt an einer Referenzstruktur ausgerichtet und für jeden Punkt eines räumlichen Gitters bestimmt, wie oft er von der Geometrie des Moleküls eingeschlossen wird. Das resultierende diskrete Skalarfeld kann in AMIRA mittels Volume Rendering oder durch Isoflächen dargestellt werden (Abbildung 2.26). Zusätzlich kann farblich kodiert werden, welche Bereiche des Moleküls in welche Raumbereiche vordringen.

QUANTENMECHANIK. Zur Visualisierung quantenmechanischer Wellenfunktionen wurde eine Methode zur quantitativen Interpretation von Isowerten für Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten erarbeitet, aus der sich bei nichtstationären Systemen eine intuitive Korrelation zwischen den Isoflächen für verschiedene Zeitschritte ergibt [15].

Virtuelles Astro-Labor

Bearbeitet von: Werner Benger, André Merzky, Hans-Christian Hege, Ralf Kähler

Kooperationspartner: AG Ed Seidel, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm; John Shalf, National Center for Supercomputing Applications (NCSA), Urbana-Champaign (Illinois,

USA); Wai-Mo Suen, Washington University (WashU), St. Louis, USA; Stefan Heusler, Arts of Science, Köln;

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft, BMBF/DFN, TIKSL-PROJEKT.

Die langwierigen und aufwendigen Simulationsrechnungen der numerischen Relativitätstheorie, wie sie am Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut) in Golm durchgeführt werden leiden, wie allen Supercomputeranwendungen, unter mangelnden Kontroll- und Steuerungsmöglichkeiten. Im Rahmen des vom DFN-Verein geförderten TIKSL-Projektes werden daher generische Mechanismen zur Behebung dieser Limits entwickelt. Die CACTUS-Anwendung des AEI spielt dabei nur eine exemplarische Rolle, die angestrebten Lösungen orientieren sich an der HDF5-Library, einer mächtigen IO-Library, die am NCSA entwickelt wird, und sind somit grundsätzlich applikationsunabhängig einsetzbar. Bislang wurde das Lesen entfernter Dateien, insbesondere der partielle Zugriff auf von der Visualisierung angeforderte Bereiche (was die hier umgesetzte Lösung wesentlich von Alternativen wie ftp, nfs etc. unterscheidet), realisiert. Auf Applikationsebene sind hierzu keine Änderungen vonnöten, die erweiterten Fähigkeiten stehen durch die Aktivierung eines „Virtual File Drivers“ auf der IO-Ebene von HDF5 zur Verfügung.

Die Verwendung des HDF5-Interfaces auch für „gestreamte“ Daten, d.h. solche, die nur im Hauptspeicher der Simulationsanwendung im Moment der Berechnung vorliegen und direkt via Netzwerkverbindung zur Visualisierungsapplikation übertragen werden, ist als nächster Schritt geplant.

VISUALISIERUNGSVERFAHREN ZUR ALLGEMEINEN RELATIVITÄTSTHEORIE. Auf Grundlage der am ZIB entwickelten „illuminated streamline“-Technik wurde ein interaktives Verfahren zur Darstellung von Geodäten, d.h. von Trajektorien frei fallender Teilchen in der numerischen Raumzeit, entwickelt (siehe Abbildung 2.27). Eine Reihe weiterer Visualisierungsverfahren, z.B. Volume Rendering wurde an die spezifischen Bedürfnisse angepaßt. Ein neuer Schwerpunkt ist die Entwicklung von Verfahren zur Visualisierung von Daten auf hierarchischen Gittern. Das im Herbst '99 begonnene Projekt stellt eine Erweiterung der Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik dar. Zu den Zielsetzungen gehören:

- die Entwicklung neuer Algorithmen zur Visualisierung von Daten auf hierarchischen, adaptiv verfeinerten Gittern
- eine Implementierung dieser Algorithmen im Visualisierungssystem AMIRA
- die Entwicklung geeigneter Hilfsmittel zur visuellen Analyse großer Datenmengen, insbesondere aus adaptiven Simulationsverfahren in der numerischen Relativitätstheorie.

Für hierarchische Datensätze wurden eine AMIRA-Datenklasse sowie zugehörige I/O-Verfahren (basierend auf der FlexIO-Bibliothek des NCSA) entwickelt. Die

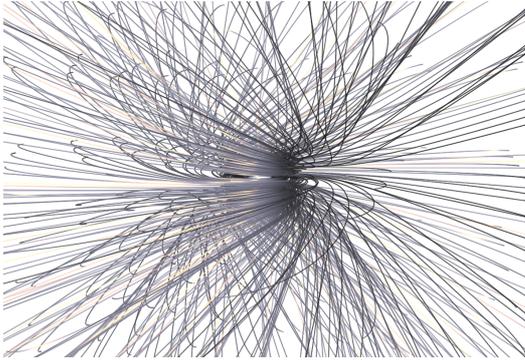


ABBILDUNG 2.27: *Geodäten (Bahnen im Schwerfeld frei fallender Teilchen) in der Umgebung eines rotierenden Schwarzen Loches. Die Teilchen wurden live während einer laufenden Cactus-Simulation via TCP/IP Datentransfer abgegriffen und in Amira dargestellt.*

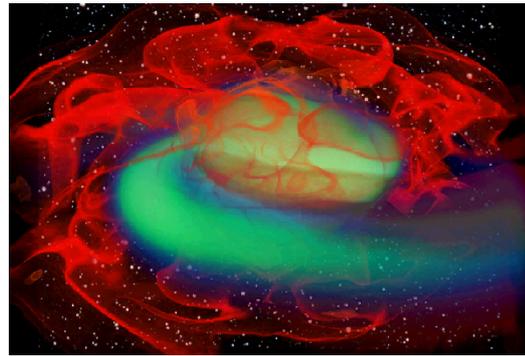


ABBILDUNG 2.28: *Simulierte Verschmelzung zweier Neutronensterne; die rot dargestellten Dichtestufen repräsentieren die Energiedichte in der Atmosphäre (Einzelbild aus dem 24-Minuten-Video „Visual Impressions of Numerical Relativity“).*

I/O-Verfahren bieten dem Anwender die Möglichkeit, einzelne Zeitschritte und Auflösungsstufen zu selektieren (eine notwendige Voraussetzung bei sehr großen Datenmengen) und wurden im Rahmen eines Workshops an der WashU an das Simulationsprogramm CACTUS angepaßt.

Um den dringenden Anwenderwunsch nach Visualisierungsmethoden für von CACTUS erzeugte AMR (Adapted Mesh Refinement)-Daten schnell zu befriedigen, wurde als Zwischenlösung ein AMIRA-Modul entwickelt, das skalare AMR-Daten auf uniforme Gitter projiziert sowie die Selektion einzelner Gitter der Hierarchie erlaubt. Damit können viele in AMIRA zur Verfügung stehende Module genutzt werden. Im Vordergrund steht aber die Entwicklung von Verfahren, die direkt auf der neuen Datenklasse operieren; ein entsprechendes Verfahren zur Darstellung von Isoflächen wurde bereits implementiert.

FILMSEQUENZEN ZUR ALLGEMEINEN RELATIVITÄTSTHEORIE. Im Sommer 1999 führten Arbeitsgruppen des AEI und der WashU auf einem Großrechner des NCSA numerische Simulationen in einer bisher unerreichten Größenordnung durch [8]. Die Daten im Umfang von 1 Terabyte wurden mithilfe einer speziellen 64-Bit-Version des Visualisierungssystems AMIRA auf dem Großrechner des NCSA aufbereitet. So konnten erstmals eine komplett in 3D simulierte Kollision zweier schwarzer Löcher, der Selbstkollaps starker Gravitationswellen und die Prozesse bei der Kollision von Neutronensternen gezeigt werden [9, 7, 3]. In Zusammenarbeit mit dem Physiker und Filmemacher Stefan Heusler, Köln, wurden die Animationsequenzen zu einem Videofilm verarbeitet, der auch Nichtwissenschaftlern einen Einblick in die aktuellen Forschungen ermöglicht [4], [5]. Eine

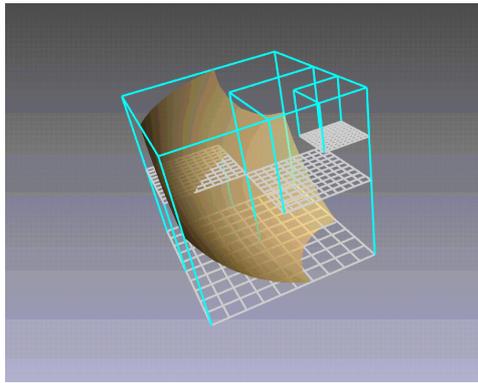


ABBILDUNG 2.29: Isoflächendarstellung eines hexagonalen AMR-Datensatzes.

Auswahl der entstandenen Filmsequenzen wird in der Ausstellung „Sieben Hügel – Bilder und Zeichen des 21. Jahrhunderts“ im Berliner Gropiusbau (Mai - Okt. 2000) auf Großdisplays öffentlich gezeigt werden.

Für die im Februar 2000 neu eröffnende Ausstellung des „Rose Centers for Earth and Science“ im American Museum of Natural History, N.Y., [1], wurde eine Animationssequenz erstellt, die den Vorbeiflug eines Schwarzen Loches in New York zeigt.

Publikationen

- [1] American Museum of Natural History, <http://www.amnh.org/>
- [2] *Amira – Advanced Visualization, Data Analysis and Geometry Reconstruction, User’s Guide and Reference Manual*, ZIB, Indeed - Visual Concepts und TGS, Okt. 1999
- [3] G. Allen, W. Benger, T. Goodale, H.C. Hege, G. Lanfermann, J. Masso, A. Merzky, E. Seidel, J. Shalf, *Solving Einstein’s Equation on Supercomputers*, IEEE Computer, 32:12 (Dec 1999), p. 52-59.
- [4] W. Benger, H-C. Hege, S. Heusler, *Visions of Numerical Relativity*, Video and Paper, Proc. SCART 2000 (Science and Art 2000 – 3rd Int. Conf. on the Interaction of Art and Fluid Mechanics), 28.2.-3.3.2000, ETH Zürich, Switzerland
- [5] Visual Impressions from Numerical Relativity SYQF 1.3, Hauptvortrag im Symposium Quantum Field Theory, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, 20.- 24.März
- [6] R. Brandt, D. Malun, A. Steege, M. Zöckler, R. Menzel (1999), *Three Dimensional Deconstruction of Honey Bee Mushroom Bodies: Comparison Between*

- Normal and Hydroxyurea-Treated Bees*, 1999 Annual Meeting of the Society for Neuroscience.
- [7] D. Butler, *Computing 2010: from black holes to biology*, Nature, 402 (Millennium Supplement), p. C67, (2. Dec 1999), www.nature.com
 - [8] K. Green, *Colliding with a Supercomputing Record*, Alliance/NCSA Access magazine 03, Fall/Winter 1999,
<http://access.ncsa.uiuc.edu/Features/o2krun/02KRecord.html>
 - [9] Max-Planck-Society, *The Biggest Crashes in the Universe*, Research News Release, 12.8.1999, http://www.mpg.de/news99/news38_99.htm.
 - [10] K. Rein, M. Zöckler, and M. Heisenberg, *A Quantitative Three-dimensional Model of the Drosophila Optic Lobes*, Current Biology, Vol. 9 No. 2 (1999), 93–96.
 - [11] K. Rein, M. Zöckler, M. Heisenberg, *Towards a Quantitative 3D Model of the Flybrain* Göttingen Neurobiology Report, N. Elsner and H.U. Schnitzler, (eds.), G. Thieme Verlag, Stuttgart 1999, 742.
 - [12] K. Rein, M. Zöckler, M. Heisenberg, *A Quantitative 3D Model of the Flybrain: Shape and Arrangement of Neuropils* Proc. First Vogt-Brodmann Symposium: Perspectives of Architectonic Brain Mapping, Düsseldorf and Jülich 1999.
 - [13] K. Rein, M. Zöckler, M. Heisenberg, *A Deformable 3D Model of the Fly Brain* Proc. Int. Conf. Neurobiology of Drosophila, Cold Spring Harbor, New York, USA, Oct. 6-10, 1999.
 - [14] D. Runge, *Algorithms and Methods for the Visualization of Molecular Surfaces and Interfaces*, Diplomarbeit 1999, Humboldt-Universität Berlin, Fachbereich Informatik <http://www.zib.de/Visual/papers/dipl.html>.
 - [15] J. Schmidt-Ehrenberg, H.-C. Hege, *Visualizing Quantum Mechanical Phenomena*, Preprint SC 99-39, ZIB, 1999.
 - [16] M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege, *Fast and Intuitive Generation of Geometric Shape Transitions*, The Visual Computer, Springer (to appear 2000).

2.2.8 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 spielen Graphen- und 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* wichtig in der kombinatorischen Optimierung, u. a. weil man eine vollständige Beschreibung ihres 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.

Eine dieser Verknüpfungen tritt im Zusammenhang mit *triangulierten Mannigfaltigkeiten* zu Tage: Informationen über die Struktur des Raumes aller möglichen Triangulierungen einer Mannigfaltigkeit ermöglichen erst die algorithmische Untersuchung traditioneller Klassifikations- und Extremalprobleme.

Neben den 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: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Annegret Wagler

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

Stabile Mengen in Graphen bilden eines der wichtigen Modelle in der ganzzahligen Optimierung mit Anwendung z. B. bei der ÖPNV-Dienstplanung (siehe Projekt „Dienstplanung“) und gewissen Fahrzeugeinsatzplanungen [3]. Das *Stabile-Mengen-Problem*, die Bestimmung einer stabilen Menge größter Kardinalität oder maximalen Gewichts im Graphen, ist jedoch i. a. NP-schwer. Ein Lösungsansatz besteht darin, das Stabile-Mengen-Problem als lineares Programm über dem *Stabile-Mengen-Polytop*, der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen, aufzufassen. Die dazu nötige Beschreibung der Facettenmenge des Polytops ist für die meisten Graphenklassen allerdings nicht bekannt.

Für *perfekte Graphen* ist das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar [6]. Ein Überblick über perfekte Graphen ist in [5] zu finden. Der Algorithmus für diesen Graphentyp beruht auf einem polynomialen Separationsverfahren für eine Klasse von Ungleichungen, die die Facetten des Stabile-Mengen-Polytops perfekter Graphen enthält. Derartige Schnittebenenverfahren [7] haben sich als sehr nützlich erwiesen, um in der Praxis Stabile-Mengen-Probleme exakt bzw. mit akzeptabler Gütegarantie zu lösen (siehe Projekt „Kombinatorische Relaxierungen“ und [3]). Ziel ist es, durch strukturelle Untersuchungen von Stabile-Mengen-Polytopen nicht perfekter Graphen, wenn möglich, die Zahl der Graphenklassen

zu erhöhen, für die polynomiale Lösbarkeit des Stabile-Mengen-Problems bewiesen werden kann.

Ein Schwerpunkt der Forschungsarbeit ist daher, für nicht perfekte Graphen Facetten des Stabile-Mengen-Polytops zu identifizieren bzw. die Facettenmengen vollständig zu beschreiben. Untersuchungsobjekte unserer Arbeitsgruppe sind Klassen „fast perfekter“ Graphen: wir verfolgen das neue Konzept *kritischer Kanten* in perfekten Graphen, deren Entfernung zum Verlust der Perfektheit des Graphen führt. Wir untersuchen verschiedene Grapheigenschaften im Zusammenhang mit kritischen Kanten ebenso wie *kritisch perfekte Graphen* (s. Abbildung 2.30), die ausschließlich kritische Kanten besitzen. Charakterisierungen kritischer Kanten einiger Graphenklassen konnten gefunden werden [15, 17]. Auf Grundlage dieser strukturellen Ergebnisse wurden Stabile-Mengen-Polytope von Graphen studiert, die durch Entfernen kritischer Kanten aus perfekten Graphen entstehen. Für einige so konstruierte Graphenklassen konnten Facetten des Stabile-Mengen-Polytops identifiziert werden [16, 17]. Für eine dieser Klassen ist es gelungen, eine vollständige Beschreibung der Facettenmenge zu beweisen [17]. Weitere Graphenklassen und polynomiale Separationsalgorithmen für die gefundenen Facetten sollen Gegenstand fortführender Untersuchungen sein.

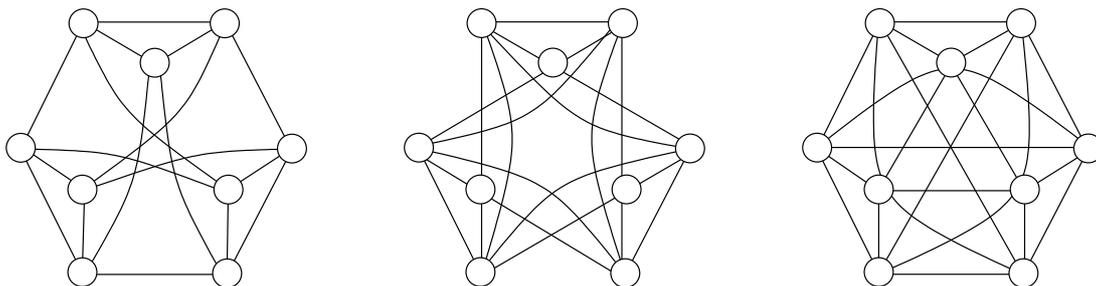


ABBILDUNG 2.30: Beispiele kritisch perfekter Graphen.

Polyedrische Unterteilungen

Bearbeitet von: Jörg Rambau

Kooperationspartner: Paul Edelman, Victor Reiner (University of Minnesota, Minneapolis, USA); Jesús A. de Loera (University of California, Davis, USA); Francisco Santos (Universidad de Cantabria, Santander, 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 (Abb. 2.31(a)), erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschie-

dener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [13]. 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 Punktfigurationsklassen betrachtet. Nachdem bereits 1997 gezeigt werden konnte, daß für zyklische Polytope die Halbordnung aller polyedrischen Unterteilungen sphärisch ist [14], wurde 1998 das bisher allgemeinste Resultat erzielt: Die Halbordnung aller durch Projektion zwischen zyklischen Polytopen induzierten polyedrischen Unterteilungen ist sphärisch [1]. Die Verallgemeinerung des sogenannten *Cayley-Tricks* aus der Diskriminantentheorie auf *induzierte* Unterteilungen (Abb. 2.31(b)) führte zu einem neuen, unabhängigen Beweis des berühmten Bohne-Dress-Theorems aus der Theorie der orientierten Matroide [8].

Im vergangenen Jahr wurde, basierend auf den Erfahrungen aus dem Projekt, das Programmpaket TOPCOM [12] veröffentlicht, mit dem sich explizite kombinatorische Berechnungen mit Triangulierungen von Punktfigurationen durchführen lassen. Mit diesem Programm wurden beispielsweise Triangulierungen mit *Flip-Defizit* von zyklischen Polytopen, Hypersimplizes und Produkten von Simplizes gefunden. Ferner wurde TOPCOM zur Validierung der Konstruktion einer Triangulierung ohne Flips in Dimension sechs auf 324 Punkten mit 25920 Simplizes von Santos erfolgreich eingesetzt.

Dieses Projekt soll mit der Fertigstellung eines Textbuches zusammen mit Jesús de Loera und Francisco Santos in den kommenden beiden Jahren abgeschlossen werden.

Triangulierte Mannigfaltigkeiten

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Anders Björner (KTH Stockholm, Schweden); Ekkehard G. Köhler, Günter M. Ziegler (Technische Universität Berlin); Wolfgang Kühnel (Universität Stuttgart)

In den Anfangszeiten der Topologie wurden Mannigfaltigkeiten vielfach anhand ihrer Triangulierungen untersucht. Insbesondere die Berechnung von Invarianten nutzte die zugrundeliegende kombinatorische Struktur, während hierfür später zunehmend algebraische Methoden Einzug fanden. Obgleich es sich herausstellte, daß nicht jede topologische Mannigfaltigkeit notwendigerweise triangulierbar ist, so ist dennoch seit dem Aufkommen von Computern das Interesse an kombinatorischen Aspekten von Mannigfaltigkeiten und ihren Triangulierungen stark gewachsen. Nötig für viele Untersuchungen ist dabei, auf Triangulierungen von handhabbarem Format zugreifen zu können.

Im Rahmen dieses Projektes konnten Methoden entwickelt werden, die es erlauben, Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten mit wenigen Ecken zu gewinnen:

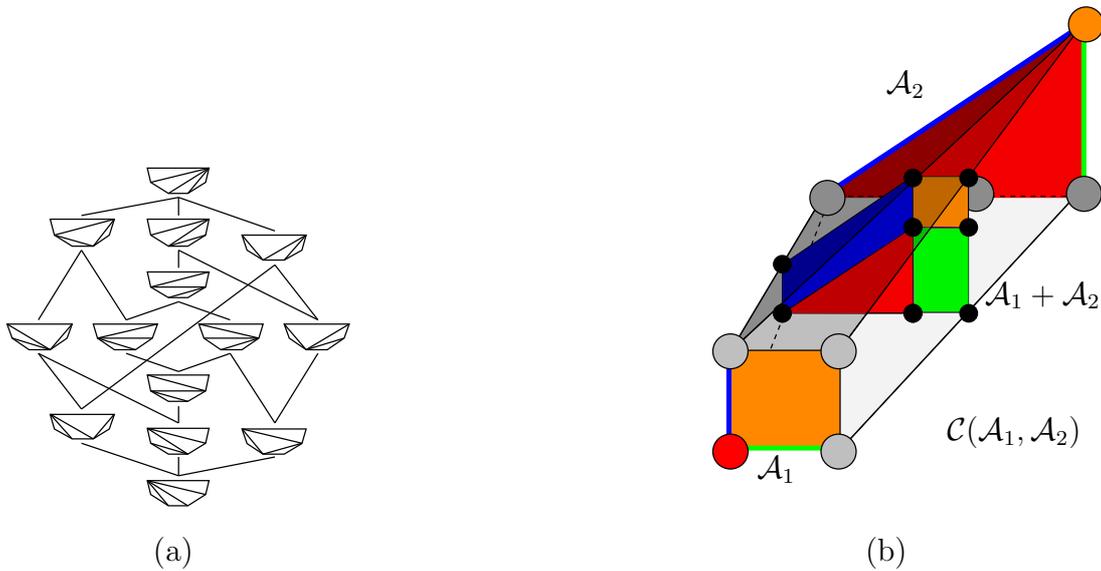


ABBILDUNG 2.31: Die (Tamari-)Halbordnung aller Triangulierungen eines Sechsecks (a); die Cayley-Trick-Korrespondenz zwischen einer Unterteilung der Cayley-Einbettung $\mathcal{C}(\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2)$ und der Minkowski-Summe $\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2$ eines Vierecks \mathcal{A}_1 und eines Dreiecks \mathcal{A}_2 (b).

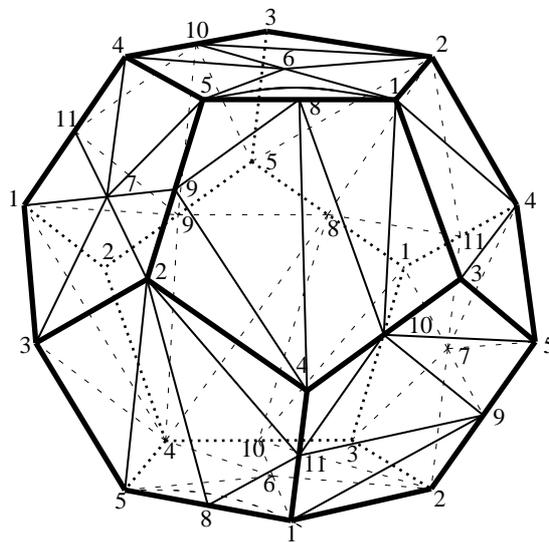


ABBILDUNG 2.32: 16-Ecken-Triangulierung der Poincaréschen Homologie-3-Sphäre (11 Ecken auf dem identifizierten Rand des Dodekaeders und 5 Ecken im Inneren).

- Mit Hilfe von sogenannten *bistellaren Operationen* lassen sich Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten lokal, unter Erhaltung des *PL*-Homöomorphietyps, modifizieren. Betrachtet man die Summe aller Seiten einer Triangulierung als zu minimierende Zielfunktion, dann erlaubt der Einsatz von Simulated annealing, lokale – in einigen Fällen sogar globale – Minima der Zielfunktion aufzusuchen. Auf diese Weise ließen sich erstmals eckenminimale Triangulierungen der Mannigfaltigkeiten $S^2 \times S^2$ mit 11, $S^3 \times S^2$ mit 12, $S^3 \times S^3$ mit 13, $(S^2 \times S^2) \# (S^2 \times S^2)$ mit 12 und $\mathbb{R}P^4$ mit 16 Ecken erzielen [2, 10, 11].
- Systematischer in der Herangehensweise ist, bestimmte Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig zu enumerieren. Dies wurde beispielsweise für eckentransitive Triangulierungen mit bis zu 13 Ecken durchgeführt, wobei viele bekannte wieder, aber auch einige interessante Beispiele neu entdeckt wurden [9, 11].

Für beide angeführten Methoden lassen sich schnell weitere Anwendungen finden. So kann auf bistellaren Flips basierendes Simulated annealing als Heuristik dazu verwendet werden, den Homöomorphietyp einer Mannigfaltigkeit zu bestimmen. Hierzu werden auf ein Testobjekt so lange bistellare Operationen angewandt, bis es letztendlich kombinatorisch isomorph zu einer bekannten „Referenztriangulierung“ einer Mannigfaltigkeit ist. Dieses Vorgehen konnte mit großem Erfolg eingesetzt werden.

Neben Mannigfaltigkeiten wurden ebenfalls eckentransitive Triangulierungen von Pseudomannigfaltigkeiten und von zentralsymmetrischen Sphären auf wenigen Ecken enumeriert. Auch hier konnten neue Beispiele gewonnen werden [11].

Publikationen

- [1] C. Athanasiadis, J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes II*, Preprint SC 98-43, ZIB, 1999, erscheint in: Publications De l’Institut Mathematique, Belgrade.
- [2] A. Björner und F.H. Lutz, *Simplicial manifolds, bistellar flips and a 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere*, Preprint 1999, erscheint in: Experimental Mathematics.
- [3] R. Borndörfer, *Aspects of set packing, partitioning, and covering*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [4] P. Edelman, V. Reiner und J. Rambau, *On subdivision posets of cyclic polytopes*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 85–101.
- [5] M. Grötschel, *My favorite theorem: characterizations of perfect graphs*, Optima Nr. 62 (1999), 2–5.

- [6] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [7] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *Geometric algorithms and combinatorial optimization*, Springer (1988).
- [8] B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Preprint SC 98-44, ZIB, 1999, erscheint in: *Journal of the European Mathematical Society*.
- [9] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Combinatorial manifolds with transitive automorphism group on few vertices*, Preprint 1999 (erhältlich bei den Autoren).
- [10] W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, *Periodica Math. Hung.*, Special Volume on Discrete Geometry and Rigidity, to appear; Preprint 1999 (erhältlich bei den Autoren).
- [11] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, Dissertation, TU Berlin, 1999, Shaker, Aachen, 1999.
- [12] J. Rambau, *TOPCOM—Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software-Paket unter der *Gnu Public Licence*, online² verfügbar, 1999.
- [13] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, *Berichte aus der Mathematik*, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [14] J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes I*, *European Journal of Combinatorics* **21** (2000), 65–83.
- [15] A. Wagler, *On critically perfect graphs*, *J. Graph Theory* **32** (1999), 394–404.
- [16] A. Wagler, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, *Discrete Applied Mathematics* **95** (1999), 455–466.
- [17] A. Wagler, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Dissertation, eingereicht an der TU Berlin, Fachbereich Mathematik, Berlin, 1999.

2.2.9 Nichtlineare Optimierung

In diesem Arbeitsgebiet werden zwei Klassen hochdimensionaler nichtlinearer Optimierungsprobleme untersucht. Konkret sind dies konvexe Probleme aus der

²<http://www.zib.de/rambau/TOPCOM>

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.

Mehrstufige konvexe stochastische Optimierung

Bearbeitet von: Marc Steinbach

Dieses Projekt verfolgt einen neuen Ansatz zur Lösung großer *mehrstufiger konvexer stochastischer Optimierungsprobleme*. Der Zugang verallgemeinert bereits bestehende Algorithmen, die sich in der nichtlinearen optimalen Steuerung als sehr effizient erwiesen haben [4, 8].

Die üblichen primalen und dualen Dekompositionsmethoden zerlegen das mehrstufige Problem 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. (Dies entspricht einer Relaxierung der *starken* Kopplungen.)

Der neue rekursive Ansatz behandelt das Optimierungsproblem global durch *primal-duale Innere-Punkt-Methoden* und nutzt die Struktur des Szenario-Baumes auf der Ebene der linearen Algebra durch rekursives Lösen der linear-indefiniten Karush-Kuhn-Tucker-Systeme. Bei iterativer Behandlung der Ungleichungsrestriktionen und ggf. weiterer Nichtlinearitäten wird hier die vertikale und horizontale Kopplung der einzelnen Knoten stets explizit berücksichtigt [7]. Eine erhebliche Beschleunigung der Konvergenz wird erreicht durch eine Warmstart-Technik, die zunächst eine grobe Approximation des Problems löst und den Szenario-Baum dann sukzessive verfeinert [5].

Verschiedene Varianten des Algorithmus sind als Klassenbibliothek in C++ implementiert. Eine problemspezifische kommerzielle Version wird von einer Schweizer Versicherungsgesellschaft bereits erfolgreich zur Lösung konvex-quadratischer finanzmathematischer Probleme eingesetzt.

Dynamisches Portfoliomanagement

Bearbeitet von: Marc Steinbach

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

Versicherungsgesellschaften und andere institutionelle Investoren verwalten Portfolios mit sehr hohen Kapitalvolumina. Die Sicherheit der Einlagen spielt hierbei eine herausragende Rolle, andererseits soll aber auch eine attraktive Rendite er-

zielt werden. Die *Dynamische Erwartungswert-Varianz-Analyse* (DEVA, Frauendorfer 1995) modelliert als direkte Verallgemeinerung des klassischen Markowitz-Ansatzes den Zusammenhang von Chance und Risiko, erlaubt aber in der aktuellen Entscheidungsfindung eine wesentlich detailliertere Abbildung der erwarteten zukünftigen Marktentwicklung über mehrere Perioden hinweg.

Ziele des Projekts sind die theoretische Analyse der entstehenden *konvex-quadratischen mehrstufigen stochastischen Optimierungsprobleme* sowie die Entwicklung und Implementierung hocheffizienter Lösungsalgorithmen. Dies wird in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Unternehmensforschung der Universität St. Gallen durchgeführt, mit dem eine formelle Kooperation besteht. Da es um sehr große Anlagebeträge geht, ist ein möglichst realistisches Modell erforderlich, das neben Leerverkaufsbeschränkungen und anderen Restriktionen auch die Transaktionskosten berücksichtigt. Besondere Schwierigkeiten entstehen einerseits durch die Größe der Optimierungsprobleme, andererseits durch die Tatsache, daß die Lösungen praktisch immer *hochgradig degeneriert* sind [6]. Die algorithmische Behandlung basiert auf der Ausnutzung problemspezifischer Sparse-Strukturen und auf den inhärenten Regularisierungseigenschaften von Innere-Punkt-Methoden [5, 7]. Eine erste kommerzielle Version des eigens entwickelten C++-Codes ist seit Ende 1999 bei einer Schweizer Versicherungsgesellschaft erfolgreich im Praxiseinsatz. Der Code löst Probleme mit mehreren 10000 Szenarien und etwa einer Million primalen Variablen auf einer Workstation.

Stochastische modellgestützte Prozessregelung

Bearbeitet von: Izaskun Garrido, Marc Steinbach

Kooperationspartner: Lorenz T. Biegler (Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA); René Henrion, Andris Möller (WIAS Berlin); Günter Wozny, Li Pu, Moritz Wendt (Technische Universität Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft

Industrielle Produktionsprozesse werden aus wirtschaftlichen Gründen oft in energie- oder kostenoptimierten Betriebsweisen gefahren. Diese schöpfen typischerweise die technischen Möglichkeiten voll aus, so daß gerade noch ein sicherer Betrieb möglich ist. Selbst kleine Abweichungen können dann große Schäden oder gar Gefahren verursachen, sofern sie nicht geeignet korrigiert werden. Hierzu werden spezielle optimierende Regler eingesetzt (*Modellgestützte Regelung*, engl. *Model Predictive Control*).

Ziel des Projekts ist es, im Rahmen dieser Verfahrensklasse einen neuen Ansatz zu untersuchen, der zur Berechnung der aktuellen Korrektur bereits die möglichen zukünftigen Störeinflüsse berücksichtigt. Dadurch wird erreicht, daß einerseits die Sicherheit gewahrt bleibt, andererseits aber der erwünschte Einspareffekt nicht durch übertrieben vorsichtige Korrekturen zunichte gemacht wird. Ein be-

reits existierendes Verfahren auf der Grundlage einer *primal-dualen Innere-Punkt-Methode* mit *direktem rekursivem Löser* für die *KKT-Systeme* ist prinzipiell zur Lösung der entstehenden extrem großen stochastischen Optimierungsprobleme geeignet [5, 7]. Zum Vergleich der Ergebnisse soll dieses Verfahren an einem Praxisbeispiel erprobt werden, das auch im Kooperationsprojekt am WIAS und an der TU Berlin untersucht wird: einer Destillationskolonne mit stochastischem Feedstrom. Weiter soll das Verfahren durch neue Techniken echtzeittauglich gemacht werden, so daß es später in der Praxis eingesetzt werden kann.

Semidefinite Programmierung

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

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

Die semidefinite Programmierung beschäftigt sich mit linearen Programmen über dem konvexen Kegel der positiv semidefiniten Matrizen. Aufgrund der nichtlinearen Struktur dieses Kegels finden sich vielfältige Anwendungsgebiete in der nichtlinearen Optimierung, insbesondere in der Kontrolltheorie, der Signalverarbeitung, der robusten Optimierung, der Materialoptimierung und nicht zuletzt in der kombinatorischen Optimierung.

Semidefinite Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme resultieren meist in semidefiniten Programmen mit Matrixvariablen großer Ordnung und vielen linearen Nebenbedingungen mit ausgeprägten Struktureigenschaften. Die Standardverfahren zur Lösung semidefiniter Programme, Innere-Punkt-Methoden, sind wegen ihrer generisch dichten Systemmatrix der Ordnung der Anzahl der Nebenbedingungen nicht zur Lösung großer Probleme geeignet.

Deshalb wurde von uns im Laufe der letzten Jahre eine alternative Methode erster Ordnung entwickelt, die auf einem Subgradientenverfahren zur Minimierung des Maximalen Eigenwertes einer affinen Matrixfunktion basiert [3, 2]. Im Gegensatz zu traditionellen Bündelverfahren der konvexen Optimierung arbeitet dieses sogenannte spektrale Bündelverfahren mit einem semidefiniten, also nicht-polyedrischen Schnittebenenmodell und nutzt damit die spezielle Struktur des Problems aus. Zur Berechnung des Funktionswertes und der Erstellung des Modells müssen für berechnete Punkte der maximale Eigenwert und ein zugehöriger Eigenvektor der entsprechenden Matrix bestimmt werden. Dies geschieht vorteilhaft mittels iterativer Verfahren wie der Lanczos Methode, die eine volle Nutzung der Struktureigenschaften der beteiligten Matrizen erlauben.

Im Berichtszeitraum haben wir das in [2] vorgeschlagene Verfahren zur Behandlung von Ungleichungen verfeinert und das Konzept der ungenauen Auswertung für das spektrale Bündelverfahren eingeführt [1]. Ungenaue Auswertung wird durch die Eigenschaft iterativer Verfahren ermöglicht, sukzessive bessere untere Schranken für den Funktionswert zu liefern, und bedeutet, daß die Berechnung

beendet werden kann, sobald die untere Schranke eine nicht ausreichende Verbesserung des Funktionswertes im neuen Testpunkt nachweist. Ohne die Konvergenz des Verfahrens zu gefährden, kann damit die Funktionsberechnung wesentlich beschleunigt werden.

Erste Experimente mit Schnittebenenverfahren basierend auf der spektralen Bündel-Methode angewandt auf die kombinatorischen Optimierungsprobleme MAX-CUT und MAX-k-CUT deuten darauf hin, daß das approximative Lösen semidefiniter Relaxationen nun auch für praxisrelevante Größenordnungen erreichbar ist. Für einige MAX-k-CUT-Beispiele aus dem Bereich der Frequenzzuweisung konnten bereits bessere Schranken erzielt werden als derzeit mit linearen Schnittebenenverfahren.

Publikationen

- [1] C. Helmberg und K. C. Kiwiel, *A spectral bundle method with bounds*, Preprint SC 99-37, ZIB, 1999.
- [2] C. Helmberg, K. C. Kiwiel und F. Rendl, *Incorporating inequality constraints in the spectral bundle method*, Integer Programming und Combinatorial Optimization (R. E. Bixby, E. A. Boyd und R. Z. Ríos-Mercado, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science 1412, Springer, 1998, 423–435.
- [3] C. Helmberg und F. Rendl, *A spectral bundle method for semidefinite programming*, Preprint SC-97-37, ZIB, August 1997, revidiert Oktober 1997, erscheint in SIAM J. Optim.
- [4] M. C. Steinbach, *Structured interior point SQP methods in optimal control*, Z. Angew. Math. Mech. **76** (1996), 59–62.
- [5] ———, *Recursive direct optimization and successive refinement in multistage stochastic programs*, Preprint SC 98-27, ZIB, 1998, erscheint in: Annals of Operations Research.
- [6] ———, *Markowitz revisited: single-period and multi-period mean-variance models*, Preprint SC 99-30, ZIB, 1999.
- [7] ———, *Recursive direct algorithms for multistage stochastic programs in financial engineering*, Operations Research Proceedings 1998 (P. Kall und H.-J. Lüthi, Hrsg.), Springer, 1999, 241–250.
- [8] 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), 303–340.

2.2.10 Telekommunikation

In den letzten Jahren wurde die Telekommunikationsbranche durch rasante Veränderungen geprägt. Sowohl der stetige technologische Fortschritt als auch die staatliche Deregulierung haben für einen sehr bewegten Telekommunikationsmarkt gesorgt. Um auf diesem Markt bestehen zu können, müssen die verfügbaren Ressourcen wirtschaftlich genutzt werden. Solche Ressourcen sind zum Beispiel verfügbare Übertragungs- und Vermittlungsbandbreiten, und diese sind in der Regel extrem kostenintensiv. Dadurch besteht immer stärkere Nachfrage nach effizienten Optimierungsverfahren, speziell aus dem Bereich der diskreten Mathematik, sowohl für Probleme im operativen wie auch im strategischen Bereich. Die in der Angewandten Mathematik angesiedelten Forschungsgruppen in Berlin waren von Beginn an in die mathematischen Aspekte des Wandels der Telekommunikationslandschaft involviert. Hierbei reicht das Spektrum der Beiträge von der Entwicklung neuer, angepaßter mathematischer Modelle für alte Problemstellungen über die Untersuchung des Potentials neuer Technologien bis hin zum Entwurf und der Implementierung neuer mathematischer Lösungsverfahren. Ein Teil der von uns entwickelten Software bewährt sich im täglichen Einsatz bei unseren Industriepartnern und stellt für gewöhnlich eine deutliche Verbesserung der zuvor eingesetzten Verfahren dar.

Standortplanung für Telekommunikationsnetze

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

Kooperationspartner: telekom austria (Wien, Österreich), E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin)

Telekommunikationsnetze sind oft hierarchisch aufgebaut. Es gibt Kommunikationsendknoten, die Ausgangs- und Endpunkt allen auftretenden Verkehrs sind. Diese müssen mit Konzentratoren verbunden werden, an denen der Verkehr mehrerer Endknoten zusammengefaßt und weitergeleitet wird. Die Konzentratoren wiederum müssen mit Kernnetzknnoten verbunden werden, die einen Teil des sogenannten Kernnetzes bilden.

Wir untersuchen in diesem Projekt die Frage, wo Konzentratoren und Kernnetzknnoten eingerichtet werden müssen, um ein den Anforderungen der Netzplaner entsprechendes, kostengünstiges Netz zu erhalten. Mit der Frage der Planung des Kernnetzes befaßt sich das Projekt „Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus“.

Um in der Praxis einsetzbare Lösungen zu erhalten, müssen bei der Planung eine Vielzahl von Anforderungen berücksichtigt werden. Beispielsweise sind nicht alle Verbindungen zwischen Knoten möglich oder die Kapazitäten unterliegen bestimmten Beschränkungen. Vielfach sind Konzentratoren und Kernnetzknnoten

noch mit diversen Kapazitätseinschränkungen versehen.

Wir haben erfolgreich begonnen, mathematische Modelle für die schwierigen, aus dieser Aufgabenstellung resultierenden Probleme zu entwickeln und Verfahren zu ihrer Lösung zu untersuchen.

Im Laufe des Jahres wurde im Rahmen des Projekts *Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)* für den und in Zusammenarbeit mit dem DFN-Verein die Standortplanung für die Kernnetzknotten des zukünftigen G-WiN erfolgreich abgeschlossen und auch umgesetzt. Das G-WiN wird im Jahr 2000 seinen Betrieb aufnehmen und mit voraussichtlich mehr als 700.000 Endnutzern und über 400 Einrichtungen eines der größten privaten Hochgeschwindigkeitsnetze der Welt sein.

Des Weiteren wurde für E-Plus eine Vorstudie zur Standortplanung im Vermittlungsnetz durchgeführt und ein Kooperationsvertrag geschlossen.

Auch für telekom austria wurde als Teil einer Studie die Standortplanung untersucht; der Abschluß eines Kooperationsvertrages auf diesem Gebiet ist mittlerweile erfolgt.

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. [6]. Die TR-Strategie ist eine leicht zu implementierende und robuste Zulassungsstrategie, mit der Ströme priorisiert und Netzinstabilitäten, wie sie durch ausuferndes Routing bei hohen Netzbelastungen auftreten, verhindert werden können. Für die verschiedenen Verkehrsströme sind die TR-Levels so zu bestimmen, daß eine vorgegebene *Quality of Service* für ein Netz garantiert und eine möglichst gute Auslastung des Netzes gewährleistet werden kann.

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

Mittelwert und Varianz eines Verkehrsstromes sind durch den Mittelwert und die Varianz der Anzahl belegter Leitungen in einem virtuellen unendlichen Bündel von Leitungen, auf das die ankommenden Calls virtuell geschickt werden, defi-

niert. Dabei haben die Belegungszeiten in dem unendlichen Bündel die gegebene Verteilung, sind aber unabhängig von schon ausgewürfelten Belegungszeiten, d. h. bei jeder (virtuellen) Ankunft werden die Belegungszeiten neu ausgewürfelt (freed Traffic). Die Spitzigkeit eines Verkehrsstromes ist das Verhältnis von Varianz und Mittelwert.

Das obige Konzept von Mittelwert und Spitzigkeit für einen Verkehrsstrom ist unabhängig vom Charakter des Verkehrsstroms, z. B. Überlaufstrom oder carried Traffic von einem anderen Link, und sollte deshalb insbesondere bei größeren Netzwerken benutzt werden. Die Berechnung der Spitzigkeit des freed carried Traffic ist jedoch sowohl theoretisch als auch numerisch recht kompliziert. Aus diesem Grund wurde das Konzept des freed Traffic bisher in Netzwerk-Analyse-Algorithmen nicht benutzt.

In diesem Projekt ist es gelungen, unter Benutzung des freed Traffic numerisch stabile Algorithmen für Mittelwerte und Spitzigkeiten der individuellen Überlaufströme und carried Traffics eines TR-Links mit zwei Ankunftsströmen, die durch ihre Mittelwerte und Spitzigkeiten charakterisiert sind, zu entwickeln. Da diese Algorithmen sehr schnell sind (nur Bruchteile einer Sekunde für einen Link der Kapazität 10 000), können sie für Netzwerk-Analyse-Algorithmen benutzt werden, die auf einer Anpassung der ersten beiden Momente und einer einheitlichen Behandlung aller Ströme beruhen. Dadurch werden neue Möglichkeiten in der Netzwerk-Analyse eröffnet.

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 Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von mathematischen Modellen und Algorithmen zur Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes G-WiN.

Das G-WiN, welches im Frühjahr 2000 das Breitband-Wissenschaftsnetz B-WiN des DFN Vereins ablösen wird, dient dem „Informations- und Datenaustausch zwischen Einrichtungen und Personen aus Wissenschaft, Forschung, Bildung und Kultur“ im In- und Ausland. Mit über 700.000 Endnutzern in ca. 400 Einrichtungen ist bereits das B-WiN eines der größten privaten Hochgeschwindigkeitsnetze der Welt. Im Gegensatz zum B-WiN, welches auf ATM-Technologie basiert und bei dem zur Zeit maximale Datenübertragungsraten bis zu 155 MBit/s möglich sind, wird das Kernnetz des G-WiN direkt auf einem optischen Netz aufsetzen. Dadurch lassen sich dort in Zukunft Übertragungsraten von 2,4 GBit/s und mehr realisieren.

Der Übergang zu dieser neuen Gigabit-Technik ist mit sehr hohen Kosten für die Beschaffung der nötigen Hardware und deren Betrieb verbunden. Somit stellt

sich die Frage, wie die bereits vorhandenen oder neu zu beschaffenden Ressourcen möglichst effizient genutzt werden können. Im Projekt „Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)“ werden zwei Planungsprobleme behandelt, die bei der Einführung und dem Betrieb dieser neuen Netztechnik auftreten.

AP1: Clustering. Im ersten Schwerpunkt wird die Frage der Auswahl der Kernnetzknotten (siehe Abbildung) und der Zuordnung der Anwenderstandorte zu diesen Kernnetzknotten im G-WiN behandelt (s. Abbildung 2.33).

Für prognostizierte Verkehrsdaten sowie kapazitäts- und längenabhängige Abschnittskosten zwischen allen Knotenpaaren im Kernnetz und im Zuleitungsnetz sollen hierbei die Kernnetzknotten aus der Menge aller potentiellen Kernnetzknotten ausgewählt werden; jeder Anwenderstandort muß gemäß den technischen und geographischen Nebenbedingungen an einen dieser Kernnetzknotten angeschlossen werden. Dabei sind die (approximierten) Kosten für das Gesamtnetz (Zuleitungs- und Kernnetz) zu minimieren. Das Problem der Auswahl der geeigneten Kernnetzknotten aus der Menge der potentiellen Kernnetzknotten ist für den DFN-Verein auch im Hinblick auf die „Annäherung an die Tarifeinheit in der Fläche“ wichtig.

AP2: Netzoptimierung. Im zweiten Schwerpunkt werden Modelle und Methoden zur Kostenoptimierung des Kernnetzes und der Zuleitungsnetze des G-WiN entwickelt. Aufbauend auf den Ergebnissen des Clustering, sind die Netztopologien, die Abschnittskapazitäten und die einzelnen Routingwege so zu bestimmen, daß die Gesamtnetzkosten minimal sind (s. Abbildung 2.34).

Dabei sind verschiedenste technische und planerische Nebenbedingungen zu berücksichtigen. So gibt es zum Beispiel Beschränkungen der je Kernnetzknotten verfügbaren Interfaces, die sich aus der verwendeten Hardware ergeben, und eine Beschränkung der maximal zulässigen Routingweglänge, um die Laufzeiten und Laufzeitschwankungen der Daten im G-WiN möglichst gering zu halten.

Außerdem sollen die Netze ein hohes Maß an Ausfallsicherheit bieten. Für das Kernnetz heißt dies, 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.

Besonders wichtig für die Optimierung ist die Berücksichtigung der Tatsache, daß im G-WiN ein statisches Open-Shortest-Path-First (OSPF) Routing-Protokoll verwendet werden soll. Dieses Protokoll definiert die Art und Weise, wie die Verkehrsströme im Netz geroutet werden und wie sich diese Routen im Fehlerfall ändern: Jeder Verbindung im Netz wird einmal bei der Konfiguration des Netzes ein Längenwert zugewiesen. Das OSPF Protokoll bestimmt dann bezüglich dieser Längenwerte für jedes Quelle-Senke-Paar einen kürzesten Weg im Netz und routet die entsprechenden Daten auf diesem Weg.

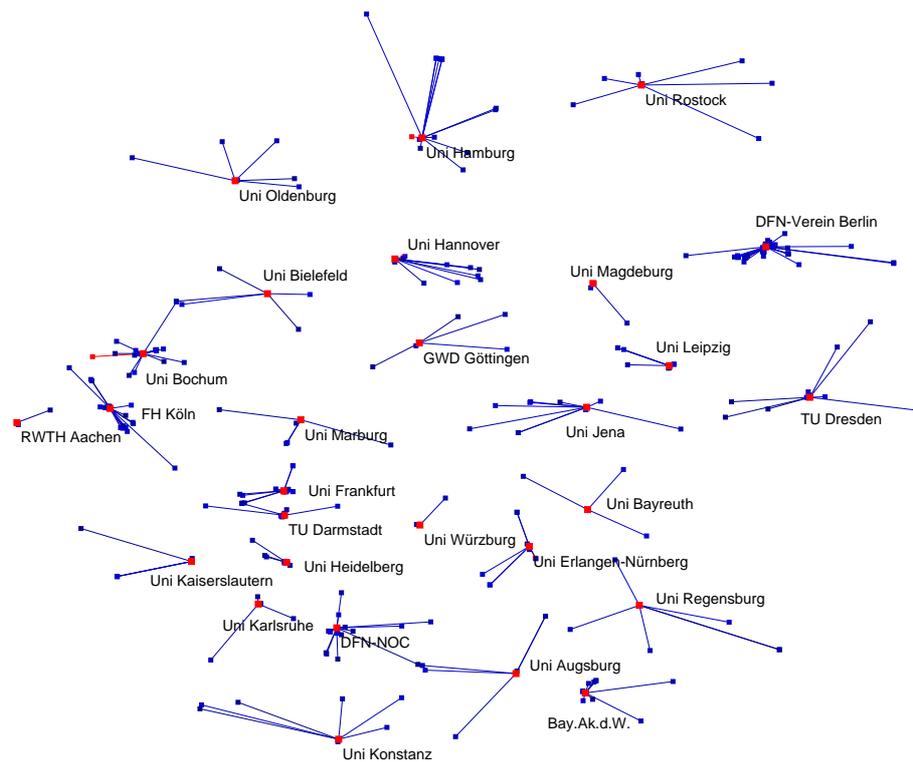


ABBILDUNG 2.33: Beispiel für die Auswahl von 28 Kernnetzknotten und die Zuordnung von 334 Nutzeranschlüssen an diese Kernnetzknotten. Dabei wurden die Anschlußkosten berücksichtigt und konstante Kosten für die Einrichtung eines Kernnetzknottes angenommen.

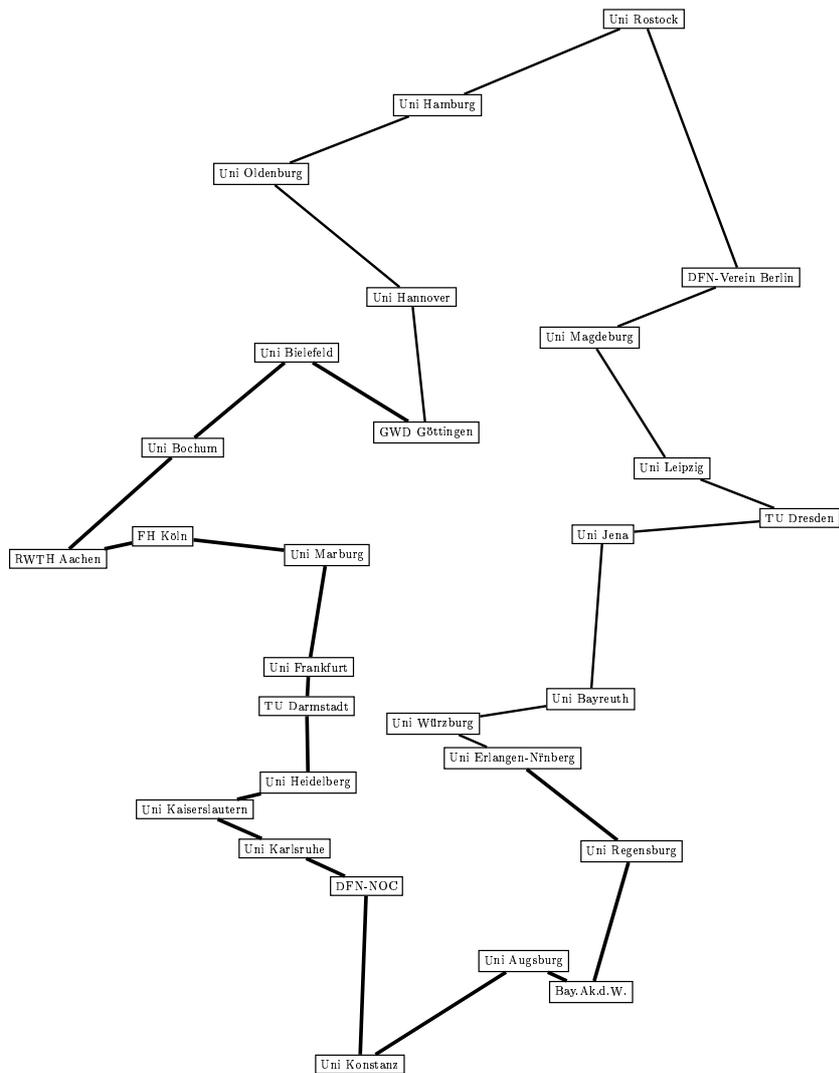


ABBILDUNG 2.34: Beispiel für ein einfaches ausfallsicheres Netzwerk minimaler Länge auf 28 Kernnetzknotten.

Basierend auf den Erfahrungen bei der Optimierung des B-WiN (siehe Projekt „Topologie-, Routing- und Kapazitätsplanung für das B-WiN“ 1997, [4]) wurden neue Modelle und Algorithmen zur Kernnetzoptimierung und zur Vernetzung innerhalb der Cluster (Kernnetzknotten und alle angebotenen Anwenderstandorte) entwickelt, die die veränderten technischen Nebenbedingungen sowie Kapazitäts- und Kostenstrukturen im Gigabitbereich besser berücksichtigen.

AP3: Betriebsoptimierung des B-WiN. Ferner wird der DFN Verein im Rahmen dieses Projektes bis zur Einführung des G-WiN bei der Betriebsplanung für das B-WiN durch regelmäßige Nachoptimierung des Netzes für die sich verändernden Verkehrsdaten unterstützt. Dazu werden die bisherigen Methoden zur „Topologie-, Routing- und Kapazitätsplanung für das B-WiN“ gemäß den sich verändernden technischen Anforderungen im B-WiN weiterentwickelt.

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 der Entscheidung, einen Tiefbauabschnitt auszuheben. Der Trassenabstand eines Endverteilers zu den Bereichs-

verteilern wird repräsentiert durch den kürzesten Weg über ausgewählte Kanten von irgendeinem Bereichsverteiler zum Endverteiler. Wir führen Kantenkosten und Kostenfaktoren für den Trassenabstand der Endverteiler ein. Das Ziel besteht darin, die Summe der Kosten für die ausgewählten Kanten und der Kosten für die Trassenabstände der Endverteiler zu minimieren. Dieses Optimierungsproblem in Graphen transformieren wir in ein Optimierungsproblem in 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 zu erreichen.

Dimensionierung des Festnetzes von E-Plus

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Roland Wessälly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

In einer Kooperation mit E-Plus untersuchen wir die Optimierung von ausfallsicheren Telekommunikationsnetzwerken. Wir betrachten unterschiedliche gemischt-ganzzahlige Modelle für die diskrete Kapazitätsstruktur sowie für die Sicherung des Netzes gegen den Ausfall einzelner Komponenten. Die theoretischen Resultate wurden in Algorithmen umgesetzt und in das von uns entwickelte Netzwerkoptimierungswerkzeug DISCNET (DIMENSIONING SURVIVABLE CAPACITATED NETWORKS) integriert, welches seit mehreren Jahren in der Planung bei E-Plus eingesetzt wird.

Wir betrachten das Transportnetzplanungsproblem eines Telekommunikationsanbieters. Dieses Problem setzt auf logischen Kommunikationsanforderungen zwischen den Standorten (Knoten) des zu planenden Netzes und potentiell installierbaren Verbindungen (Kanten) zwischen derselben Knotenmenge auf. Ein Kapazitätsmodell stellt die Information bereit, welche Kapazitäten auf den potentiellen Kanten verfügbar sind. Wir betrachten zwei Modelle. Entweder ist eine explizite Liste der verfügbaren Kapazitäten gegeben oder eine Menge von sogenannten Basiskapazitäten, die auf jeder Kante individuell kombiniert werden können. Die Basiskapazitäten müssen paarweise ganzzahlige Vielfache voneinander sein. Man beachte, daß diese Eigenschaft von den internationalen Standards PDH und SDH erfüllt wird. Ein Ausfallsicherheitsmodell stellt die Information bereit, wie das zu planende Netz gegen den Ausfall einzelner Netzkomponenten geschützt werden soll. Wir betrachten sinnvolle Kombinationen der Modelle DIVERSIFICATION, RESERVATION und PATH RESTORATION. Das erste Modell garantiert Ausfallsicherheit durch kommunikationsbedarfsabhängige Beschränkung des Prozentsatzes, der durch einzelne Netzkomponenten geroutet werden darf. Bei den beiden anderen Modellen können Kommunikationsbedarfe bei Ausfall einer Netzkompo-

nente auf unterschiedliche Weise neu geroutet werden. Ziel der Planung ist eine kostenminimale Kapazitätsentscheidung, die eine Routenplanung aller Kommunikationsbedarfe gemäß den Ausfallsicherheitsanforderungen ermöglicht.

Wir haben ein Schnittebenenverfahren (siehe [2, 3, 1, 9])) zur Lösung der betrachteten Optimierungsprobleme entwickelt. Mithilfe neuer Klassen von Ungleichungen, Separationsalgorithmen und Heuristiken werden in dem Schnittebenenverfahren untere und obere Schranken für den Wert von Optimallösungen berechnet. Daher ist es möglich, Qualitätsgarantien für die berechneten Lösungen anzugeben. Die Algorithmen wurden erfolgreich auf Probleme mit mehr als 2 Billionen Variablen angewendet.

Frequenzzuweisung im Mobilfunk

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel

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. Im Regelfall heißt das: wenn sie denselben oder benachbarte Kanäle verwenden.

Bei der Erstellung eines *Frequenzplanes* hat der Netzbetreiber für jeden Transceiver festzulegen, welcher Kanal genutzt werden soll. Da die Anzahl der Transceiver die der verfügbaren Kanäle oft um den Faktor 30 und mehr übersteigt, müssen Kanäle mehrfach verwendet werden. Dies geschieht unter Berücksichtigung einer Reihe von technischen und rechtlichen Nebenbedingungen mit dem Ziel, möglichst wenig störende Interferenzen zu verursachen. Eine Schätzung der gegebenenfalls auftretenden Interferenz erhält der Netzbetreiber durch Signalprädiktionsrechnungen oder, in seltenen Fällen, durch Meßfahrten. Neben der geeigneten Repräsentation der technischen und rechtlichen Nebenbedingungen stellen die Interferenzprädiktionen den Hauptanteil der Eingabedaten für die Frequenzplanung dar.

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

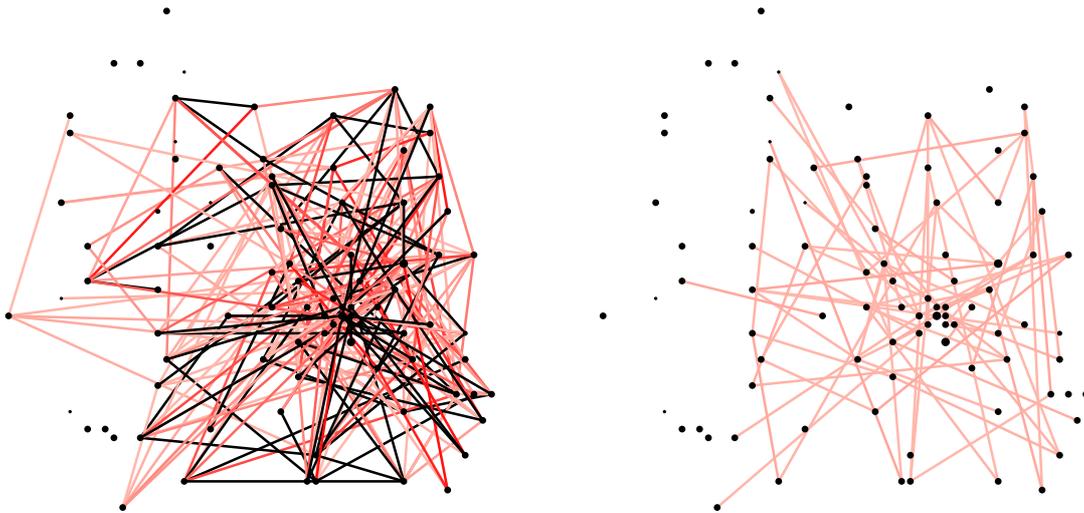


ABBILDUNG 2.35: Die beiden Bilder zeigen die Interferenzsituation eines Gebietes für zwei verschiedene Frequenzpläne. Die schwarzen Punkte stellen Standorte von Transceivern dar. Interferieren zwei Transceiver, so ist dies durch eine Linie symbolisiert. Je dunkler die Linie, desto stärker ist die Interferenz. Links ist die Interferenzsituation für einen Plan visualisiert, der mit einem kommerziellen Planungswerkzeug erstellt wurde. Der Plan, der dem rechten Bild zugrundeliegt, wurde mit im Rahmen des Projektes entwickelten primalen Heuristiken berechnet. Die Interferenz ist auf 4.2% des Ausgangswertes reduziert.

rungen erzielt werden [5], siehe Abbildung 2.35. Ein Teil der Verfahren ist seit längerem bei der E-Plus Mobilfunk GmbH im praktischen Einsatz und hat sich dort bewährt [7]. Derzeit wird daran gearbeitet, die Verfahren besser an die praktischen Planungsbedürfnisse anzupassen, siehe zum Beispiel [8].

Außerdem wird erprobt, mit welchen Verfahren sich abschätzen läßt, wieviel Interferenz jeder zulässige Frequenzplan problembedingt mindestens verursachen muß. Zwei Ansätze werden verfolgt, die prinzipiell auch für praxisrelevante Problemgrößen einsetzbar sind. Zum einen ist das ein Branch&Cut-Verfahren, zum anderen ein Zugang über die Lösung eines semidefiniten Programmes.

Frequenzplanung für Punkt-zu-Mehrpunkt-Funksysteme

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

Kooperationspartner: BOSCH-Telecom GmbH (Backnang)

Ein Punkt-zu-Mehrpunkt-Funksystem dient der Anbindung von Kundenterminals an Basisstationen mittels Richtfunk. Im Unterschied zum Mobilfunk verfügt

jeder Kunde über eine fest installierte Antenne und ist einer bestimmten Basisstation zugeordnet (Sektorisierung siehe Abb. 2.36(a)). Unter gewissen Bedingungen stören sich Funkverbindungen, falls diese die gleichen Frequenzen benutzen. Zur Gewährung einer interferenzfreien Datenübertragung im System sind zwei Planungsprobleme zu lösen: die Bandbreiten- und die Broadcast-Kanal-Planung.

Die Bandbreitenplanung umfaßt das Problem, den einzelnen Richtfunkstrecken Frequenzintervalle aus einem vorgegebenen Frequenzspektrum zuzuweisen. Ziel ist die Erstellung von Frequenzplänen (Abbildung 2.36(c)) mit geringem Bandbreitenbedarf unter Berücksichtigung einiger technischer Nebenbedingungen und der verschiedenen Kommunikationsbedarfe der Kunden. Die Bandbreitenplanung kann modelliert werden als Intervallfärbungsproblem auf gewichteten Graphen (mit allen Kunden als Knoten und deren Interferenzbeziehungen als Kanten, siehe Abb. 2.36(b)). Diese Art von Problemen ist NP-schwer und nicht mit konstanter Gütegarantie approximierbar. Daher stand die Entwicklung verschiedener schneller Heuristiken im Mittelpunkt. Während der Projektlaufzeit wurden zunächst erste primale Startheuristiken und ein duales Verfahren implementiert und getestet. Darauf aufbauend wurden weitere primale Start- und Verbesserungsheuristiken entworfen und implementiert. Mithilfe dieser Algorithmen konnten kleine und mittlere Probleme optimal gelöst werden. Die maximale Abweichung des Bandbreitenbedarfs der primalen Lösung von dem der dualen Lösung betrug höchstens 15 % (für die von BOSCH-Telecom zur Verfügung gestellten Problembeispiele).

Die Broadcast-Kanal-Planung umfaßt die Vergabe eines gesonderten Frequenzkanals an jeden Sektor, der dem Protokollverkehr zwischen der Basisstation und allen zugeordneten Kunden dient. Ziel ist es, jedem Sektor im System einen Broadcast-Kanal unter Beachtung aller Interferenzbeziehungen zuzuweisen und dabei insgesamt eine minimale Anzahl von Kanälen zu benutzen. Dieses Problem entspricht einem Färbungsproblem auf dem Graphen mit allen Sektoren als Knoten, der die Interferenzbeziehungen im System geeignet wiedergibt. Färbungsprobleme sind ebenfalls NP-schwer, die geringeren Problemgrößen gestatteten hier aber den Einsatz eines exakten Verfahrens mit verschiedenen Zeitschranken. Für alle von BOSCH-Telecom zur Verfügung gestellten Problembeispiele konnte ein optimaler Broadcast-Kanal-Plan erstellt werden.

Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel, P. Jonas, U. Paul und R. Wessälly. *Survivable mobile phone network architectures: Models and solution methods*, IEEE Communications Magazine **36** (1998), 88–93.
- [2] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessälly. *A network dimensioning tool*, Preprint SC 96-49, ZIB, 1996.
- [3] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessälly. *Cost-efficient network synthesis*

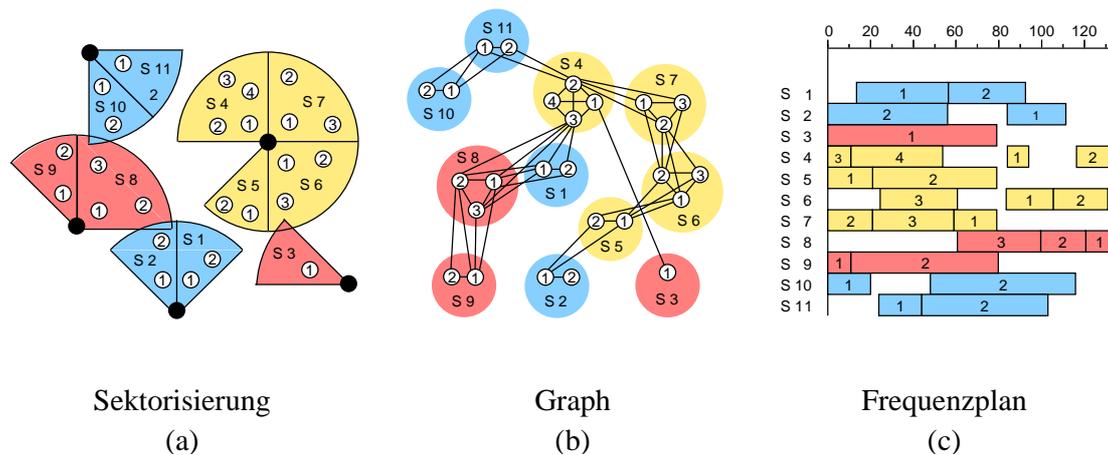


ABBILDUNG 2.36: Frequenzplanung in Punkt- zu Mehrpunkt-Funksystemen.

from leased lines, *Annals of Operations Research* **76** (1998), 1–20.

- [4] 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.
- [5] R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin, *Frequency Assignment in Cellular Phone Networks*, *Annals of Operations Research* **76** (1998), 73–93.
- [6] A. Brandt und M. Brandt, *Approximation for overflow moments of a multiservice link with trunk reservation*, *Proceedings of SPIE, Performance and Control of Network Systems III*, Boston, USA, Vol. 3841, 1999, 86–93.
- [7] Andreas Eisenblätter, Thomas Kürner und Reiner Fauß, *Radio planning algorithms for interference reduction in cellular networks*, *Communications for the Millennium. COST 252/259 Joint Workshop*, University of Bradford, 21–22 apr 1998., 1998, 87–92.
- [8] Andreas Eisenblätter, Thomas Kürner und Reiner Fauß, *Analysis of c/i-ratio thresholds for frequency planning*, *Tech. Report COST 259, TD(99) 012*, COST 259, 1999.
- [9] R. Wessäly. *Dimensioning Survivable Cellular phone NETWORKS*. Dissertation, TU Berlin, 2000.

2.2.11 Ganzzahlige Optimierung

Probleme der ganzzahligen Optimierung stellen sich überall dort, wo Güter oder Entscheidungen unteilbar sind. Ein Zug hat eine ganzzahlige Anzahl von Wagen,

Personale kann man nur personenweise zuordnen, für Datenleitungen in der Telekommunikation stehen nur Kapazitäten von 64 KBit, 2 MBit, 34 MBit, 155 MBit, 622 MBit, 2.4 GBit oder 10 GBit und deren ganzzahlige Kombinationen zur Auswahl usw.

Zu den bewährtesten Methoden zur Lösung von ganzzahligen Optimierungsproblemen zählen die Schnittebenenverfahren. Die Idee besteht darin, die Lineare Programmierung als Rechenmethode einzusetzen. Auf diese Weise lassen sich die gewaltigen algorithmischen und rechnentechnischen Fortschritte in diesem Gebiet für die ganzzahlige Optimierung nutzbar machen.

Eine bedeutende Forschungsaufgabe ist das Studium allgemeiner ganzzahliger und gemischt-ganzzahliger Programme. General-Purpose-Methoden (Projekt Gemischt-Ganzzahlige Programmierung) sind wichtig, wenn z. B. in der Industrie unter Zeitdruck gearbeitet wird oder das Potential von Ansätzen und Modellen abgeschätzt werden soll. Ähnlichen Zielen dient das Studium von Methoden, die die Übertragung und Verallgemeinerung von Ergebnissen auf andere Probleme betreiben (Projekt Kombinatorische Relaxierungen).

Für besonders wichtige Probleme, für sehr große Instanzen und für algorithmische Spitzenleistungen muß man Spezialstudien betreiben. Im Berichtszeitraum haben wir an zwei Problemen geforscht. Das m -Cost ATSP, eine Variante des berühmten Travelling-Salesman-Problems, tritt bei der Steuerung von Druckmaschinen auf. Das Steinerbaumproblem spielt u. a. im Chip-Design und in der Genetik eine Rolle.

Gemischt-Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Alexander Martin

Kooperationspartner: Robert E. Bixby (Rice University, Houston, USA), Robert Weismantel (Universität Magdeburg)

Seit nunmehr fünf Jahren wird am ZIB das Softwarepaket SIP zur Lösung allgemein gemischt-ganzzahliger Programme entwickelt, d. h. zur Lösung von Problemen, bei denen eine lineare Zielfunktion unter einem System von linearen Nebenbedingungen zu optimieren ist, wobei einige oder alle Variablen ganzzahlig sein müssen. Tabelle 2.2 gibt Auskunft über den erzielten Fortschritt in den vergangenen Jahren.

Zu den nennenswerten Neuerungen, die im vergangenen Berichtszeitraum 1999 hinzugekommen sind, gehören eine effiziente Speicherverwaltung, eine Beschleunigung der Branch-and-Bound Komponenten sowie die Implementierung und Verbesserung von Separierungsverfahren für neue Schnittebenen. Unter dem letzten Punkt besonders zu erwähnen sind die Gomory-Schnitte, die bereits nach ihrer Entwicklung in den 60er Jahren fast in Vergessenheit geraten waren und heute wiederentdeckt wurden, vgl. [6]. In der Tat können durch Hinzunahme dieser Schnitte in SIP eine Reihe von allgemein gemischt-ganzzahligen Programmen

Version	keine Lösung	mit Gütegarantie	Optimal	Zeit (sec.)
1995	34	3	22	134845.5
1997	2	16	41	66687.4
1999	1	10	48	51582.1

Tabelle 2.2: Die Rechnungen wurden an der MIPLIB auf einer Sun Enterprise 3000 mit einer 336 MHz CPU und einer Laufzeitschranke von einer Stunde durchgeführt. Spalte 2 gibt an, für wieviele der 59 Probleme keine zulässige Lösung gefunden werden konnte. Spalte 3 und 4 zeigen die Probleme, für die eine Gütegarantie gegeben werden konnte bzw. die Anzahl optimal gelöster Probleme. In der letzten Spalte sind die Gesamtlaufzeiten zu sehen.

deutlich schneller gelöst werden.

Darüber hinaus sei erwähnt, daß SIP erfolgreich zur Lösung von Standortplanungsproblemen beim DFN (vgl. Projekt „Standortplanung für Telekommunikationsnetzwerke“) eingesetzt wurde. Damit erfüllte sich eine der ursprünglichen Intentionen bei der Entwicklung von SIP, durch dessen Verwendung als Basistool Projekte aus der Praxis deutlich schneller und effizienter durchführen zu können.

Kombinatorische Relaxierungen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer

Kooperationspartner: Robert Weismantel (Universität Magdeburg)

Die Konstruktion von Relaxierungen ist einer der erfolgreichsten Ansätze in der ganzzahligen Optimierung. Gruppen-, Lagrange-, LP- oder semidefinite Relaxierungen können theoretische Einsichten liefern und die rechnerische Behandlung kombinatorischer Optimierungsprobleme vereinfachen oder in vielen Fällen sogar erst ermöglichen.

Wir untersuchen eine neue Klasse von kombinatorischen Relaxierungen, bei der kombinatorische Optimierungsprobleme durch andere kombinatorische Optimierungsprobleme approximiert werden. Die Verbindung zwischen den Problemen stellt eine algebraische Transformation dar, durch die sich polyedrische Kenntnisse und Separierungsverfahren direkt von der Relaxierung auf das Ausgangsproblem übertragen. Auf diese Weise werden Kenntnisse und Verfahren für individuelle Probleme allgemein nutzbar.

Der Schwerpunkt der Untersuchungen lag im Berichtszeitraum auf Set-Packing- und Knapsack-Relaxierungen. Das Set-Packing- und das Knapsack-Problem sind neben dem Travelling-Salesman-Problem wohl die am intensivsten untersuchten harten kombinatorischen Optimierungsprobleme überhaupt, für die tiefe strukturelle Ergebnisse und eine große Anzahl von Schnittebenen und zugehörigen Separierungsverfahren bekannt sind. Mit unseren Techniken konnten wir diese Er-

gebnisse auf andere kombinatorische Optimierungsprobleme übertragen. Für das Azyklische-Subdigraphen-Problem, das Clique-Partitioning-Problem, das Max-Cut-Problem und einige weitere konnten wir bekannte Typen von Ungleichungen verallgemeinern und teilweise erstmals polynomial separieren. Für das Steinerbaumproblem, das Asymmetrische-Travelling-Salesman-Problem und das Set-Covering-Problem konnten wir neue polynomial separierbare Typen finden. Unsere Set-Covering-Ungleichungen sind die ersten polynomial separierbaren kombinatorischen Schnittebenen für diese Problemklasse. Erste Testrechnungen verliefen vielversprechend.

Kombinatorische Relaxierungen werden in [1, 2, 3] diskutiert.

Das m -Cost ATSP

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG

Das m -Cost ATSP dient zur Modellierung von Auftragsplanungsproblemen für mehrere, nicht notwendigerweise identische Maschinen mit reihenfolgeabhängigen Rüstzeiten. Ausgangspunkt der Untersuchungen war eine derartige Aufgabe im Fertigungsbereich Rotationsdruck-Geschenkpapier der Firma Herlitz PBS AG.

Beschreibung des Auftragsplanungsproblems. Der Firma Herlitz stehen zum Druck von Geschenkpapier zwei Rotationstiefdruckmaschinen zur Verfügung, die sich in Druckgeschwindigkeit, bearbeitbaren Materialien, Möglichkeit des Rückseitendrucks und weiteren technischen Details unterscheiden. 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. Um von einem Geschenkpapier auf das nächste umzurüsten, kann es nötig sein, Druckzylinder, Materialart, Materialbreite, Presseure oder Farben auszutauschen. Diese Rüstvorgänge sind sehr zeitaufwendig und können die reine Druckzeit übersteigen. In Zusammenarbeit mit der Firma Herlitz wurde ein detaillierter Algorithmus zur Bestimmung dieser Rüstzeiten erarbeitet.

Mathematische Modellierung. Gegeben sind m nicht notwendigerweise identische Maschinen sowie n Aufträge. Für jede Maschine und jedes geordnete Paar von Aufträgen ist bekannt, wie lange die Abarbeitung des zweiten Auftrags direkt nach Fertigstellung des ersten auf dieser Maschine benötigt. Gesucht ist eine Aufteilung der Aufträge auf die Maschinen und eine Reihenfolge auf jeder Maschine, so daß der letzte Auftrag möglichst früh fertiggestellt wird.

Wir formulieren das Auftragsplanungsproblem als ganzzahliges (binäres) lineares Programm mit konvexer, stückweise linearer Zielfunktion. Die konvexe Hülle der zulässigen Lösungen bezeichnen wir als das m -Cost-ATSP-Polytop. Die Lösung des Problems mittels eines Branch&Cut-Verfahrens erfordert ein gutes Verständnis dieses Polytops. In [4] konnten wir zeigen, daß für mehr als zwei Maschinen alle facettendefinierenden Ungleichungen des Ein-Maschinen-Unterproblems direkt

Facetten des m -Cost ATSP Polytops induzieren, und entwickelten einen polynomialen exakten Separator für eine „neue“ Klasse von Facetten des Ein-Maschinen-Unterproblems, die sogenannten v_0 -Schnitt-Ungleichungen. Diese Ungleichungen entsprechen den modifizierten Kurzzyklus-Ungleichungen des Prize-Collecting-ATSP, das mit dem Ein-Maschinen-Unterproblem eng verwandt ist. Für eine weitere neue Facetten-Klasse, die geschachtelten Konflikt-Ungleichungen, ist uns leider kein polynomialer Separierungs-Verfahren bekannt. Beide Klassen von Ungleichungen erzeugen auch im Falle von zwei Maschinen Facetten des m -Cost-ATSP-Polytops.

Die praktische Erprobung des Branch&Cut-Codes bei Herlitz ergab, daß eine exakte Zeitplanung mittels des Programms aufgrund hoher Maschinenausfallraten und personenabhängiger Bearbeitungszeiten nicht möglich ist. Die Experten bei Herlitz zeigten sich jedoch mit der Qualität des Plans äußerst zufrieden.

Zur Zeit arbeiten wir an der Weiterentwicklung des Codes, um auch allgemeinere Auftragsplanungsprobleme erfolgreich lösen zu können, und an der Entwicklung geeigneter Heuristiken zur Separierung der geschachtelten Konflikt-Ungleichungen.

Optimale Lösung von Steinerbaumproblemen in Graphen

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Alexander Martin

Kooperationspartner: A. Schaffer (National Institutes of Health, USA), A. Rohe (Universität Bonn)

Das Steinerbaumproblem in Graphen läßt sich wie folgt formulieren: In einem Graphen $G = (V, E, c)$ mit einer Knotenmenge V , einer Kantenmenge E und Kantengewichten c_e sowie einer Menge $T \subseteq V$ von ausgezeichneten Terminals wird ein T aufspannender Subgraph von G minimalen Gewichts gesucht. Hierbei sind auch Varianten möglich, z.B. das Steinerarboreszensproblem, bei dem in einem gerichteten Graphen $G = (V, A, c)$ eine T aufspannende Arboreszens mit Wurzel $r \in T$ gesucht wird (s. Abbildung 2.37).

Beim Gruppensteinerbaumproblem sind disjunkte Mengen $T_i \subseteq V$ gegeben; die Lösung ist ein aufspannender Baum in G , der mindestens einen Knoten aus jedem T_i enthält. Weitere Varianten sind Steinerbaumprobleme mit Längenbeschränkung oder das kostensammelnde Steinerbaumproblem. Ebenso kann das Problem eingeschränkt sein, wenn z.B. der zugrundeliegende Graph ein Gittergraph ist. Das Steinerbaumproblem in Graphen ist wie die meisten seiner Varianten (insbesondere alle hier genannten) NP-schwer.

Im Rahmen dieses Projekts wurde ein sehr erfolgreiches Programm zur Lösung von Steinerbaumproblemen erstellt [5]. Das Programm basiert auf einem Schnittebenenverfahren und wird durch vielfältiges Preprocessing und primale Heuristiken ergänzt. Es ist uns gelungen, beweisbar optimale Lösungen für praktisch alle in der Literatur bekannten Instanzen des Steinerbaumproblems in Graphen zu

finden.

Im Rahmen von Kooperationen wurde auch an der Lösung von praktisch auftretenden Problemen gearbeitet. So konnten Lösungen für Steinerarboreszenzprobleme gefunden werden, die aus Vererbungsgraphen entstanden sind und für Genanalysen benötigt werden. Ebenso wird an der Lösung von Gruppensteinerbaumproblemen gearbeitet, um die Entwicklung guter Heuristiken für das VLSI-Layout zu unterstützen.

Wir haben eine Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen eingerichtet, die als Teil der eLib des ZIB über das Internet³ für jeden Interessierten zugreifbar ist.

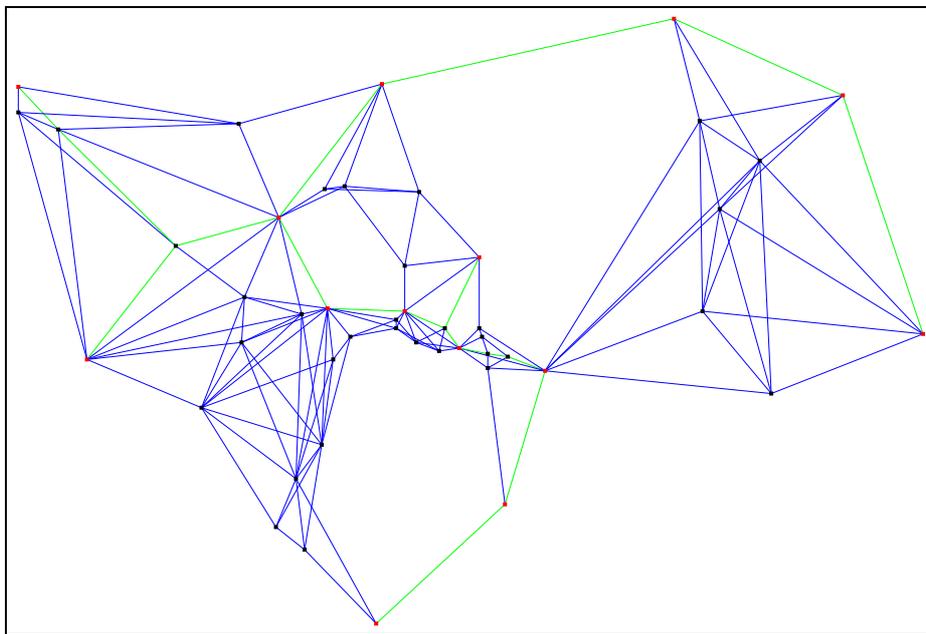


ABBILDUNG 2.37: Beispiel für die Optimallösung eines Steinerbaumproblems mit 52 Punkten in Berlin.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, *Aspects of set packing, partitioning, and covering*, Dissertation, TU Berlin, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1998.
- [2] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Relations among some combinatorial programs*, Preprint SC 97-54, ZIB, 1997.
- [3] ———, *Set packing relaxations of some integer programs*, Preprint SC 97-30, ZIB, 1997, erscheint in *Math. Programming*.

³<ftp://ftp.zib.de/pub/Packages/mp-testdata/steinlib>

- [4] C. Helmberg, *The m -Cost ATSP*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (G. Cornuéjols, R. E. Burkard und G. J. Woeginger, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science 1610, Springer, Juni 1999, 242–258.
- [5] T. Koch und A. Martin, *Solving Steiner tree problems in graphs to optimality*, Networks **32** (1998), 207–232.
- [6] H. Marchand, A. Martin, R. Weismantel und L. A. Wolsey, *Cutting planes in integer and mixed integer programming*, Technical Report CORE DP9953, Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgien, 1999.

2.2.12 Online-Optimierung

In der klassischen kombinatorischen Optimierung geht man davon aus, 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 in der Praxis auftretenden Situationen 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.

Eine Fülle von Online-Problemen tritt z. B. bei der Steuerung automatischer Transportsysteme auf. Bediengeräte von Hochregallagern, fahrerlose Versorgungsfahrzeuge u. ä. werden sorgfältig entworfen, damit notwendige Transportaufgaben effizient erledigt werden können. Derartige Systeme sind 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.

Da für einen Online-Algorithmus am Anfang noch nicht alle Daten feststehen, müssen von ihm laufend Ad-hoc-Entscheidungen auf der Basis unvollständigen Wissens getroffen werden, die später nicht wieder rückgängig gemacht werden können. Eine Steuerung, die bzgl. der zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannten Daten optimal ist (*zeitlich* lokal optimal), kann nach Eingang eines neuen Auftrags oder einer neuen Materiallieferung schon nachteilige Auswirkungen haben, die auch durch Reoptimierung nicht immer wettzumachen sind (Online-Anforderung). Alle Entscheidungen müssen zusätzlich zu bestimmten Terminen, d. h. unter strikten Zeitbeschränkungen, gefällt werden (Echtzeit-Anforderung).

Echtzeitsteuerung von Aufzugsystemen

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Die effiziente Steuerung von Aufzugsystemen ist ein Problem, welches in natürlicher Weise Online-Charakter besitzt: Bei der 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 i. d. R. nicht vorhergesagt werden. Ein Kennzeichen bei der Steuerung von Aufzugsystemen 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 verringern.

Ziel ist es, effiziente Online-Algorithmen für die Steuerung von Aufzugsystemen zu entwickeln, die sowohl gute theoretische Eigenschaften (beweisbare Güte) besitzen als auch praktischen Anforderungen (insbesondere dem Echtzeit-Aspekt) genügen. Schnelle Offline-Verfahren und Approximations-Algorithmen spielen eine nicht zu unterschätzende Rolle, da viele Online-Algorithmen Offline-Lösungen zur Reoptimierung verwenden und dafür ständig neue Instanzen eines verwandten Offline-Problems lösen müssen.

Im vergangenen Jahr konnten wir zeigen, daß die Offline-Minimierung der Gesamtfertigstellungszeit eines Aufzuges auch unter Präzedenznebenbedingungen polynomial lösbar ist, wenn man Start- und Stopzeiten vernachlässigt. Die Berücksichtigung von Start- und Stopzeiten läßt das Problem jedoch NP-schwer werden [9]. Für ein allgemeineres Transportproblem (Dial-a-Ride-Problem) auf Graphen konnten immerhin effiziente Approximations-Algorithmen mit beweisbarer Güte angegeben werden.

Online-Steuerungen, die unsere Offline-Optimierungs-Algorithmen benutzen, liefern sowohl nach den neuen Analysemethoden aus dem Projekt „Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen“ als auch in Simulationen auf Basis der Simulationsbibliothek AMSEL [1] häufig bessere Zielfunktionswerte als die einfachen Ad-Hoc-Steuerungen, die häufig in existierenden Transportsystemen ihren Dienst verrichten (s. Abbildung 2.38).

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

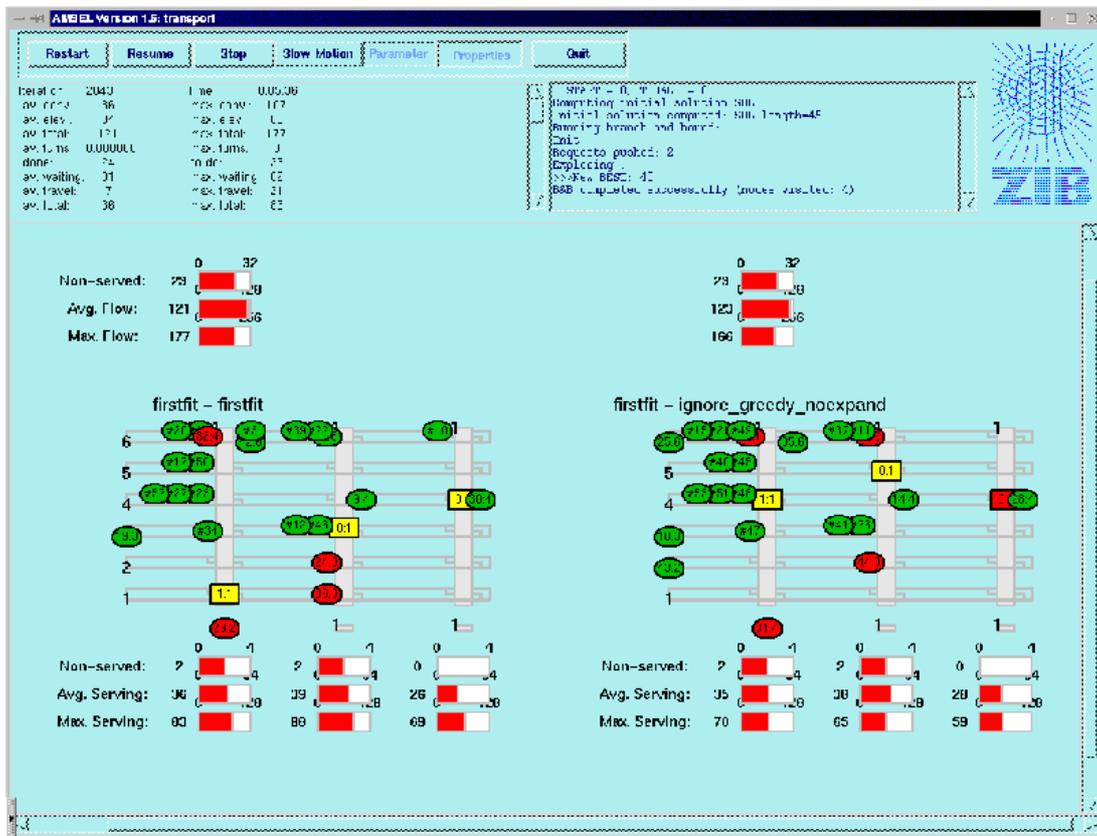


ABBILDUNG 2.38: Bildschirmdarstellung des Simulationsprogramms für Aufzugsysteme.

„Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Algorithmen für Online-Probleme werden in der Literatur oft mit Hilfe der *kompetitiven Analyse* bewertet. Dabei vergleicht man den Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung. Die kompetitive Analyse ist eine „Worst-Case-Analyse“, die in vielen Fällen übermäßig pessimistisch ist. Online-Steuerungsstrategien, die *in der Regel* – d. h. für die weitaus meisten Entwicklungen in der zum Zeitpunkt der Entscheidung unbekanntem Zukunft – gute Ergebnisse liefern, in Ausnahmefällen aber völlig versagen, sind vom Standpunkt der kompetitiven Analyse her disqualifiziert.

Ziel des Projekts ist es, praxistaugliche mathematische Modelle für derartige Online-Aufgaben mit Echtzeitanforderungen 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 führen. Das Hauptziel besteht darin, Online-Algorithmen mit mathematisch beweisbarer Güte zu entwickeln.

Nachdem 1998 bereits Kompetitivitätsresultate für elementare Transportprobleme mit einem Server gezeigt wurden [2], konnten diese Ergebnisse 1999 deutlich verbessert und verallgemeinert werden [3]. Für das sogenannte Online-Dial-a-Ride-Problem wurde ein – vom Standpunkt der kompetitiven Analyse her – optimaler Algorithmus gefunden, der für beliebig viele Server einsetzbar ist. Als Nebenprodukt konnten dabei bekannte Ergebnisse aus der Literatur über Online-Scheduling verbessert bzw. verallgemeinert werden.

Bei Transportproblemen fällt allerdings auf, daß in der bekannten Literatur bisher kein Konzept vorhanden ist, *offensichtlich absurde* Anforderungen an das System aus der Analyse auszuschließen. Zwar konnten wir für einen Spezialfall des Online-TSP durch ein neues Adversary-Konzept [5], welches den übermächtigen Offline-Gegner realistischer beschränkt, verbesserte Kompetitivitätsresultate beweisen; für praxisrelevante aber notorisch „schwierige“ Zielfunktionen jedoch – wie die Minimierung der durchschnittlichen oder maximalen Flußzeit (d. h. die Zeit, die ein Auftrag im Transportsystem verbringt) – gibt es nachweislich keine kompetitiven Algorithmen. In diesem Fall existieren also keine durch kompetitive Analyse begründbaren Entscheidungshilfen für die Auswahl eines Online-Algorithmus.

In diesem Zusammenhang konnten wir im vergangenen Jahr eine Alternative zur kompetitiven Analyse vorstellen. Das Hauptergebnis dieses Ansatzes ist eine Gütegarantie für die maximale und durchschnittliche Flußzeit für einen Online-Algorithmus unter sogenannter *vertretbarer Belastung* [8].

Integrierte Echtzeitoptimierung heterogener Transportsysteme

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Vollautomatische innerbetriebliche Transportsysteme bestehen häufig aus mehreren unterschiedlichen Modulen wie Förderbändern, Vertikalförderern und Hochregallagerbediengeräten. Methoden zur bestmöglichen Steuerung eines solchen Transportsystems müssen das Zusammenspiel dieser Komponenten im Gesamtsystem berücksichtigen.

Ziel dieses Projektes ist es, echtzeitfähige Online-Optimierungsverfahren für *heterogene* Transportsysteme zu entwickeln. Untersucht werden beispielsweise Integrationseffekte bei der Steuerung von Vertikalförderern und Hochregallagerbediengeräten, die an ein gemeinsames Zubringerfördersystem angeschlossen sind. Unser industrieller Partner, die Herlitz PBS AG, Berlin, stellt uns in diesem Zusammenhang Daten seines vollautomatischen Palettenfördersystems in Falkensee bei Berlin zur Verfügung.

Für die nichtintegrierte Steuerung von Zubringersystem und Vertikalförderern des Herlitz-Lagers ist im vergangenen Jahr festgestellt worden, daß einerseits die Aus-

lastung der Aufzüge sehr ungleichmäßig ist und andererseits die Optimierungseffekte in der Aufzugsteuerung (siehe Projekt „Echtzeitsteuerung von Aufzugssystemen“) durch das Zubringersystem weitgehend nivelliert werden können [6, 7].

Wir untersuchen daher eine komplett integrierte Optimierungsmethode von Zubringersystem und Vertikalförderern, die in Spezialfällen auf Multi-Server-Traveling-Salesman-Probleme mit zusätzlichen Nebenbedingungen führt. Bezüglich der Evaluierung von Online-Algorithmen ist dieses Projekt gleichzeitig eine ausgezeichnete Meßplatte für die im Projekt „Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen“ entwickelten Methoden.

Publikationen

- [1] N. Ascheuer, *Amsel—A Modelling and Simulation Environment Library*, Online-Dokumentation¹ erhältlich.
- [2] N. Ascheuer, M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Combinatorial online optimization*, Proceedings of the International Conference of Operations Research (OR'98), Springer, 1998, 21–37.
- [3] ———, *Online dial-a-ride problems: Minimizing the completion time*, Proceedings of the 17th International Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2000.
- [4] N. Ascheuer, M. Grötschel, N. Kamin und J. Rambau, *Combinatorial online optimization in practice*, OPTIMA—Mathematical Programming Society Newsletter (1998), Nr. 57, 1–6.
- [5] M. Blom, S. O. Krumke, W. de Paepe und L. Stougie, *The online-TSP against fair adversaries*, Proceedings of the 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2000.
- [6] M. Grötschel, D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *Simulation studies for the online dial-a-ride problem*, Preprint SC 99-09, ZIB, 1999.
- [7] D. Hauptmeier, *Online algorithms for industrial transport systems*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 1999, online² erhältlich.
- [8] D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *The online dial-a-ride problem under reasonable load*, Proceedings of the 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2000.
- [9] D. Hauptmeier, S. O. Krumke, J. Rambau und H.-C. Wirth, *Euler is standing in line*, Proceedings of the 25th International Workshop on Graph-Theoretic

¹<http://www.zib.de/ascheuer/AMSEL.html>

²<http://www.zib.de/groetschel/students/diplomhauptm.pdf>

Concepts in Computer Science, Ascona, Switzerland, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 1999, 42–54.

2.2.13 Verkehr

Das ständig wachsende Verkehrsaufkommen stellt hohe Anforderungen an die Planung von Individualverkehr und öffentlichem Personennahverkehr (ÖPNV): *„Die Lebens- und Zukunftsfähigkeit unserer Städte und Regionen entscheidet sich auch an der Frage, wie wir vor Ort unsere Mobilitätsprobleme lösen. Gerade Busse und Bahnen bieten die Chance, die Mobilitätsbedürfnisse unserer Gesellschaft vor allem in den Großstädten und Ballungsräumen effizient, sicher und ressourcenschonend zu gewährleisten.“* (Aus der Rede von Bundesminister Reinhard Klimmt anlässlich der Fachkonferenz „Kommunale Verkehrsunternehmen im europäischen Wettbewerb“, 19.10.1999)

Unser Ziel in diesem Schwerpunkt ist die Entwicklung von mathematischen Methoden der Verkehrsplanung. Unsere Vision ist die Entwicklung einer Methodologie des *Computer Aided Scheduling* (CAS) mit Planungswerkzeugen, die der Verkehrsplaner benutzt wie der Konstrukteur sein 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 bereits 1984 formulierte.³

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 der Integration dieses Tools in die Softwareprodukte HOT und MICROBUS unserer Kooperationspartner HanseCom GmbH und IVU GmbH arbeiten wir an der praktischen Umsetzung dieser Resultate.

Für die Zukunft visieren wir ein Nachfolgeprojekt zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung an. Diese Fragestellung ist einerseits für Verkehrsbetriebe in ländlichen Regionen interessant, da dort nur wenige Ablösepunkte zur Verfügung stehen und Dienst- und Umlaufplan stark voneinander abhängen; andererseits versprechen wir uns bei großen Verkehrsbetrieben weitere Einsparungen durch die dort stärker auftretenden Integrationseffekte.

³Wissenschaftlicher Beirat beim Bundesminister für Verkehr, Gruppe Verkehrstechnik, *Zur Bedeutung interaktiver Planungs- und Organisationshilfen im Verkehrswesen*, Internationales Verkehrswesen **3** (1984), 167–174.

Fahrzeugumlaufplanung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Andreas Löbel

Kooperationspartner: Berliner Verkehrsbetriebe (BVG, Berlin); IVU AG (Berlin)

Bei der Umlaufplanung im ÖPNV geht es darum, einen Fahrplan mit möglichst wenigen Fahrzeugen zu realisieren. Das Problem stellt sich im Luftverkehr, bei der Bahn und – wie in unserem Projekt – im Nahverkehr. Typischerweise treten Depots auf, heterogene Fahrzeugflotten und Fahrten, die den Einsatz geeigneter Fahrzeugtypen erfordern.

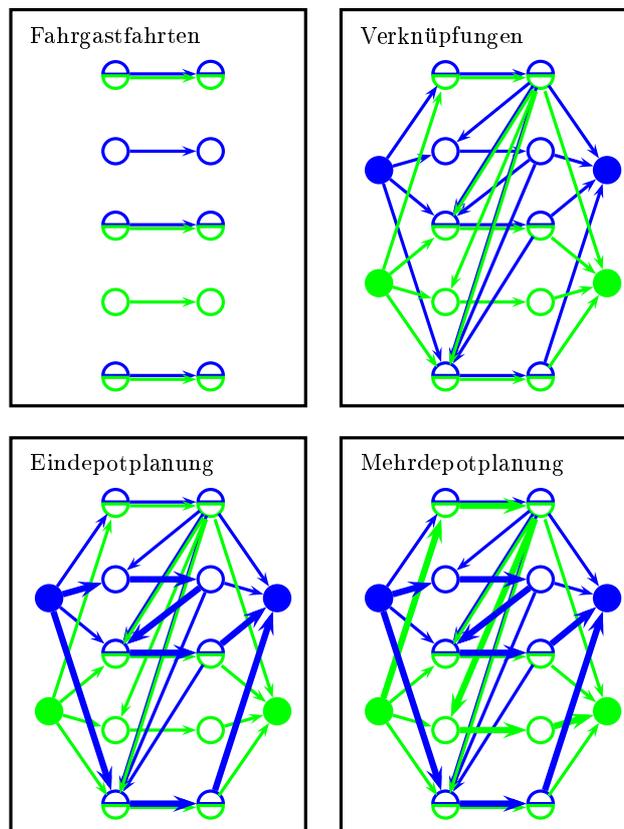


ABBILDUNG 2.39: Methodik der Umlaufplanung.

Wir haben ein Optimierungssystem entwickelt, das auf Mehrgüterflußmodellen der ganzzahligen Optimierung basiert (siehe Abb. 2.39). Im algorithmischen Kern ist eine neue Lagrangean-Pricing-Technik umgesetzt, die die optimale Lösung größter Instanzen mit 10 Depots, 14 Fahrzeugtypen und 28.000 Fahrgastfahrten erlaubt. Dabei werden implizit bis zu 100 Millionen theoretisch mögliche Betriebsfahrten zur Konstruktion der Fahrzeugumläufe in Betracht gezogen. Erstmals

besteht damit die Möglichkeit der betrieblichen Gesamtplanung. Die Nutzbarmachung der Potentiale aus der linien- und depotübergreifenden Planung sowie die Kontrolle von Depotzuordnungen von Linien und Fahrzeugen sind die Hauptvorteile unseres Ansatzes.

Auf diese Weise konnten nachweislich erhebliche Einsparungen erzielt werden. So arbeiteten wir im Berichtszeitraum an der praktischen Umsetzung der Ergebnisse bei der BVG. Dazu haben wir Methoden zur präzisen und flexiblen Kalibrierung des Tools entwickelt. Zusammen mit den Planern vor Ort konnten wir nachweisen, daß es möglich ist, Umlaufpläne zu erzeugen, die mit geringfügiger manueller Nachbearbeitung direkt in den Fahrbetrieb übernommen werden können. Anforderungen wie die Tauglichkeit der Umläufe für die nachfolgende Dienstplanung, die Vermeidung von Line-Hopping etc. konnten erfüllt werden.

Unsere Verfahren sind in die Planungssysteme MICROBUS II der IVU AG und BERTA der BVG integriert, die Siemens AG hat Rechte erworben.

Optimierungsmethoden zur Fahrzeugumlaufplanung im ÖPNV werden in [2], [6] behandelt, ihre Anwendung bei der BVG in [8]. Die mathematischen Verfahren finden sich in der Dissertation [6], einzelne Aspekte werden in [4], [7] (LP-Techniken), [3] (Lagrange-Verfahren) und [5] (Dantzig-Wolfe-Dekomposition) diskutiert.

Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Birgit Grohe, Andreas Löbel

Kooperationspartner: Berliner Verkehrsbetriebe (BVG, Berlin); IVU AG (Berlin); HanseCom GmbH (Hamburg)

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das Problem der Konstruktion von (zunächst anonymen) Diensten tritt überall dort auf, wo Aufgaben auf Personale verteilt werden. Typisch für diese Fragen sind eine Vielzahl von gesetzlichen, tariflichen, betrieblichen und technischen Regelungen für Gültigkeit und monetäre Bewertung einzelner Dienste. In unserem Projekt werden Dienste im Nahverkehr geplant, also z. B. der Einsatz der Busfahrer. Die gleichen Fragen, mit entsprechend modifiziertem Regelwerk, treten aber auch im Luftverkehr, bei der Bahn und in Krankenhäusern auf.

Wir haben ein Optimierungssystem zur Dienstplanung entwickelt, dessen algorithmischer Kern ein Column-Generation-Verfahren zur impliziten Lösung von Set-Partitioning-Problemen ist, die wiederum auf einem graphentheoretischen Modell der Dienstplanung basieren (siehe Abb. 2.40). Das Neue an unserem Verfahren ist die „adaptive“ Herangehensweise, bei der die auftretenden Unterprobleme durch dynamisch konstruierte Relaxierungen approximiert werden. Solange ein globaler Fortschritt im Verfahren erzielt wird, führt diese Technik zu keinerlei Einbußen. Die Schwierigkeit liegt in der Konstruktion einer guten Relaxierung, die diejenigen Teile des Problems enthält, die eine Verbesserung möglich machen.

Wir lassen uns dabei vom Ablauf des Optimierungsprozesses leiten (Adaptivität). Da im Laufe des Verfahrens immer wieder neue Relaxierungen konstruiert werden, können Auslassungen später korrigiert werden.

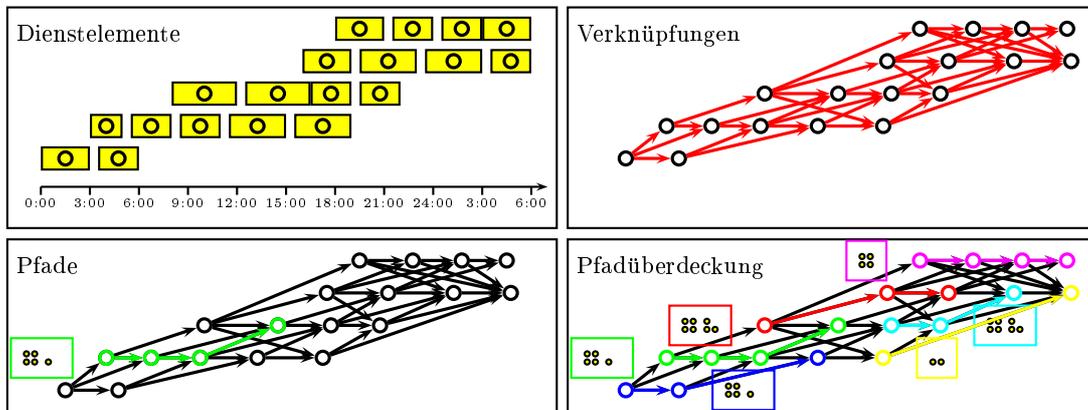


ABBILDUNG 2.40: Nach der Definition der Dienstelemente werden alle erlaubten Verknüpfungen generiert. Pfade mit bestimmten Eigenschaften in dem so entstandenen Graphen entsprechen zulässigen Diensten, eine Pfadüberdeckung ergibt einen Dienstplan.

Wir zielen mit unserem Verfahren auf die Lösung von Dienstplanungsproblemen mit bis zu 10.000 Dienstelementen ab. Für kleine und mittlere Verkehrsbetriebe läßt sich damit eine betriebliche Gesamtplanung durchführen, bei sehr großen Unternehmen wie den Berliner Verkehrsbetrieben (BVG) deckt diese Planungsmasse den Bedarf für einen Betriebshof ab. Insbesondere werden damit Potentiale aus der linienübergreifenden Planung nutzbar.

Erste Prototypen unserer Dienstplanungssoftware werden zur Zeit in das Planungssystem MICROBUS II der IVU integriert und demnächst bei Pilotkunden eingeführt.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, A. Löbel, U. Strubbe und M. Völker, *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*, Heureka '99: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (1999), 171–194.
- [2] M. Grötschel, A. Löbel und M. Völker, *Optimierung des Fahrzeugumlaufs im öffentlichen Nahverkehr*. In *Mathematik – Schlüsseltechnologie für die Zukunft*, Springer (1997).
- [3] A. Kokott und A. Löbel, *Lagrangean relaxations and subgradient methods for multiple-depot vehicle scheduling problems*, Preprint SC 96-22, ZIB, 1996.

-
- [4] A. Löbel, *Solving large-scale real-world minimum-cost flow problems by a network simplex method*. Preprint SC 96-07, ZIB, 1996.
- [5] ———, *Experiments with a Dantzig-Wolfe-decomposition for multiple-depot vehicle scheduling problems*. Preprint SC 97-16, ZIB, 1997.
- [6] ———, *Optimal vehicle scheduling in public transit*, Dissertation, TU Berlin, 1997.
- [7] ———, *Recent computational developments for large-scale multiple-depot vehicle scheduling problems*. Preprint SC 97-17, ZIB, 1997.
- [8] A. Löbel und U. Strubbe, *Wagenumlaufoptimierung – Methodischer Ansatz und praktische Anwendung*, Heureka '96: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (1996), 341–355.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Ralf Borndörfer

- Joachim-Tiburtius-Preis des Landes Berlin

Martin Grötschel

- Gewählt zum Foreign Associate der amerikanischen National Academy of Engineering
- Wissenschaftspreis der Gesellschaft für Operations Research (GOR)

Alexander Martin

- Ruf auf eine C4-Professur für Mathematik an der Technischen Universität Darmstadt (angenommen zum 01.01.2000)

Christof Schütte

- Ruf auf eine C4-Professur an der Universität Düsseldorf (abgelehnt am 07.12.1999)
- Ruf auf eine C4-Professur am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin (angenommen zum 01.01.2000)

Detlev Stalling

- Carl-Ramsauer-Preis 1999 der Fa. TEMIC (früher AEG)

Lin Zschiedrich

- Diplomarbeit, Preis der Studierendenkonferenz der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, (gestiftet von Anderson Consulting)

Wissenschaftliche Dienstleistungen

3.1 Überblick

Die Außenwirkung des ZIB im Arbeitsbereich der Wissenschaftlichen Dienstleistungen war im Berichtszeitraum durch Aktivitäten der folgenden Projekte bestimmt:

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen (Museumsprojekt)

Zunächst sollen die allgemeinen Zielsetzungen dargestellt werden. Anschließend folgen ausführlichere Beschreibungen der Schwerpunkte des Arbeitsbereiches Wissenschaftliche Dienstleistungen.

KOBV: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg ist ein gemeinsames Vorhaben der Länder Berlin und Brandenburg bzw. der wissenschaftlichen Bibliotheken dieser Region und des ZIB mit der Zielsetzung, das Bibliothekswesen durch die Einführung einer offenen Verbundstruktur zu modernisieren und zu reformieren. Technisch-organisatorischer Kern dieses Projektes ist die Entwicklung der KOBV-Suchmaschine (gemeinsam mit der Firma *Ex Libris Ltd.* mit Sitz in Tel Aviv), welche die Kataloge der Partnerbibliotheken des KOBV zu einem virtuellen Katalog vereint. Die Bestände der Bibliotheken dieser Region, die zu den wertvollsten und reichhaltigsten in Deutschland zählen, sollen über die KOBV-Suchmaschine erschlossen werden - über das Internet innerhalb der Region und weltweit im WWW.

Das Projekt hat im Frühjahr 1997 begonnen und konnte im November 1999 den Betrieb mit einer ersten Version der KOBV-Suchmaschine aufnehmen. Es hat bei seinen Partnern zu einer umfassenden Modernisierungswelle geführt: Die großen Universitäts- und Hochschulbibliotheken der Länder haben mit und durch das Projekt in ihren Institutionen integrierte Bibliotheksinformationssysteme erstmalig eingeführt oder bestehende Bibliothekssysteme den Anforderungen des KOBV folgend grundlegend erneuert, wobei das zentrale System technisch mit vielen unterschiedlichen lokalen Systemen kommunizieren kann. Der KOBV ist ein offener

Bibliotheksverbund. Er soll nach Ablauf des Projektes ab Januar 2001 auf Dauer eingerichtet werden.

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 hat das Math-Net-Projekt eine angemessene organisatorische und technische Infrastruktur aufgebaut, die darüber hinaus Modellcharakter sowohl für andere (am Projekt) nicht unmittelbar beteiligte 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.

Museumsprojekt: Hier entwickelt das ZIB z.B. im Auftrag der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung 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 das Museumsprojekt auch inhaltlich mitgewirkt hat.

Computeralgebra: Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.7 des Computeralgebrasystems REDUCE von Tony Hearn, dem Leiter des Projekts, freigegeben. Diese Version hat ein erheblich erweitertes Leistungsspektrum, insbesondere durch einige neue Softwarepakete, die zur Zeit nur innerhalb des Systems REDUCE angeboten werden. Zu nennen sind hier die Pakete zur Berechnung von Comprehensive Groebner Bases und das Logikpaket REDLOG. Ausserdem werden durch spezielle Module die neuentwickelten Standards MathML und OpenMath zur Kommunikation mathematischer Objekte unterstützt.

Weiterhin wurden die Distributionsmaterialien und die Dokumentation zur neuen Version weitgehend überarbeitet. Die Präsentation des Systems im Internet wurde völlig neu gestaltet. Die vollständige Systemdokumentation und die Beschreibungen der einzelnen Module ist in Form von PDF Dateien im Web abgelegt und kann von den Benutzern mittels eines Browsers direkt eingesehen werden.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Ervin Hizliok, 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

Die wissenschaftlichen Bibliotheken Berlins und Brandenburgs haben im Rahmen des KOBV-Projektes im Jahre 1999 einen großen Sprung nach vorne gemacht. In den Bibliotheken der Universitäten Berlins und der Hochschule der Künste wurde das integrierte Bibliotheksinformationssystem Aleph500 der Firma Ex Libris Ltd., Tel Aviv, eingeführt. In den Bibliotheken der Universitäten und Fachhochschulen des Landes Brandenburg wurde der Übergang zur neuesten Version des Bibliothekssystems SISIS vollzogen, das bezüglich der für die technische Einbindung notwendigen Schnittstelle (Z39.50) nun den erforderlichen KOBV-Standard erfüllt. Das wichtigste Ereignis in diesem Jahr war jedoch die Eröffnung des KOBV im November, die mit der offiziellen Inbetriebnahme der ersten Version der KOBV-Suchmaschine einherging, welche die Kataloge (OPACs) der Region zu einem virtuellen Katalog zusammenfaßt. Damit ist der Grundstein für den KOBV gelegt, der unterschiedliche Bibliothekssysteme zu einer "Einheit" zusammenfaßt. Der Benutzer kann nach der Suche in der KOBV-Suchmaschine per Mausklick – nahtlos – in die entsprechenden lokalen Kataloge "springen".

Diese Entwicklungen bilden eine hervorragende Grundlage, den KOBV als "Institution" langfristig einzurichten. Das soll nach Ablauf des KOBV-Projektes zu Beginn des Jahres 2001 geschehen. Die Vorarbeiten dazu haben bereits im Berichtszeitraum begonnen. Dazu hat die Expertengruppe des KOBV neue Empfehlungen vorgelegt und das Steuerungsgremium des KOBV hat entsprechende Beschlüsse gefaßt. Der KOBV hat jetzt die Chance und das technische Potential, neben dem Regelbetrieb auch einige für Bibliotheksverbände völlig neuartige Dienstleistungen aufzubauen. Hierzu gehören

- Direktzugriff von Benutzern auf Bibliothekskataloge und regionaler Ausleihverbund
- Erweiterte Integration von Bibliotheken über regionale Grenzen hinweg

- Neuartige Zusammenarbeit von Bibliotheken im heterogenen Serviceverbund
- Integration von Informationsangeboten und -technologien aus dem World Wide Web.

Die KOBV-Suchmaschine wurde vor allem unter dem Gesichtspunkt des Nutzens und der Perspektive der Benutzer entwickelt, die nun Bibliotheken online von ihrem Arbeitsplatz aus integriert oder individuell in Anspruch nehmen können.

Der Weg zu diesem ersten “Zwischenergebnis” des KOBV-Projektes war nicht einfach. Die verschiedenen Phasen der Entwicklung der Suchmaschine waren von intensiven Designgesprächen und konzeptionellen Diskussionen innerhalb des aus den Mitgliedern der israelischen Entwickler von Aleph500 und der KOBV-Projektgruppe am ZIB gebildeten Entwicklungsteams gekennzeichnet. Nicht alle der ursprünglich geplanten technischen Zielsetzungen ließen sich in diesem auch von ökonomischen Randbedingungen geprägten Projekt realisieren. Ein Beispiel: Die parallel verteilte Suche - ein Leitkonzept des KOBV - ließ sich zwar für Benutzer im Web verwirklichen, nicht jedoch für Katalogisierer in den örtlichen Bibliotheken, die die Suchmaschine in ihrem eigenen Bibliothekssystem mittels des Z39.50-Protokolls nutzen. Für sie wurde deshalb eine auf ihre Bedürfnisse abgestimmte sequentiell verteilte Suche vereinbart. Diese ist zum gegenwärtigen Zeitpunkt allerdings noch nicht realisiert. Der von Ex Libris vorgeschlagene gemeinsame Index des KOBV entwickelte sich - insbesondere durch die Beiträge des ZIB zur Dublettenbehandlung - zu einem ursprünglich in dieser Form nicht vorhergesehenen innovativen Konzept.

Die zweite Phase des Projektes war von intensiven Testarbeiten geprägt - insbesondere auf Seiten der örtlichen Bibliotheken. Die Einführung von Aleph500 in den “Aleph-Bibliotheken” des KOBV, dem sogenannten Aleph-Konsortium, war von umfangreichen Onlinediskussionen begleitet und wäre wohl ohne die Werkzeuge der elektronischen Kommunikation in der Kürze der zur Verfügung stehenden Zeit kaum durchzuführen gewesen. Hier wurden einige tausend Emails ausgetauscht, von denen einige hundert zu “formalen” Fehlermeldungen führten. Den Bibliotheken konnten schon zur Mitte des Jahres spezielle Dienste des KOBV, wie z.B. ein Fremddatenserver mit den Daten der Deutschen Nationalbibliographie, zur Verfügung gestellt werden.

Die Einführung der neuen Bibliothekssysteme war in den örtlichen Bibliotheken von umfangreichen Schulungsmaßnahmen begleitet. Die KOBV-Projektgruppe am ZIB hat die Einführung der Suchmaschine darüber hinaus durch eine Reihe von Publikationen, Präsentationen und öffentlichen Informationsveranstaltungen unterstützt. Das KOBV-Projekt¹ hat außerordentlich großen Wert auf eine transparente Darstellung dieses organisatorisch und technisch innovativen Verbund-

¹(<http://www.kobv.de>)

konzeptes gelegt. In diesen Zusammenhang gehört, daß die Bibliotheksöffentlichkeit nicht nur in Berlin und Brandenburg, sondern deutschlandweit mittels eines WWW-Servers permanent und praktisch lückenlos über die Fortschritte des Projektes unterrichtet wird.

Publikationen

- [1] M. Grötschel, M. Kuberek, S. Lohrum, J. Lügger, B. Rusch: *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg*, ABI Technik 4 (4. Vj. 1999), 19. Jg., S. 350-367.
- [2] M. Kuberek: *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Ein innovatives Verbundkonzept für die Region*, Vortrag auf dem 89. Deutschen Bibliothekartag, 25. - 29. Mai 1999 in Freiburg (Breisgau). in: 89. Deutscher Bibliothekartag in Freiburg im Breisgau 1999, ZfBB, Sonderheft 77, [Jan.] 2000, S. 115–126. auch: SC 99-50, ZIB, 1999.
- [3] M. Kuberek (Red.): *Gemeinsamer KOBV-Standard*. in: Bibliotheksdienst 33 (1999), Heft 11, S. 1863–1873, auch: SC 99-14, ZIB, 1999.
- [4] K. Penke, D. Scharna J. Willenborg: *Bibliotheksverzeichnisse zur Auswahl von Bibliotheksbeständen in verteilten Informationssystemen - Untersuchung und Einsatz im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*, in: Bibliotheksdienst 33 (1999), Heft 10, S. 1667 - 1698.

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

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Wolfram Sperber

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

Das Projekt "Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)", begann am 01.01.1997 und endete am 30. April 1999. Insgesamt neun Projektpartner an den mathematischen Fachbereichen der Universitäten Chemnitz, Halle, Kaiserslautern, Köln, München, Osnabrück, Paderborn und Rostock beteiligten sich unter der Projektleitung des ZIB. Das Hauptziel des Projektes war die Entwicklung und der Aufbau eines nutzergesteuerten und effektiven elektronischen

Informations- und Kommunikationssystem für die Mathematik.

Das Math-Net ist ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik. Es basiert auf den lokalen Informationsangeboten der Fachbereiche, die im Math-Net integriert, nutzerfreundlich aufbereitet und zugänglich gemacht werden sollen. Das Math-Net ist durch die freiwillige Mitarbeit weiterer Institutionen in Deutschland zu einem flächendeckenden Dienst ausgebaut worden. Die am Projekt beteiligten Institutionen haben die mathematischen Institutionen in ihrer Region beim Aufbau eines qualitativ hochwertigen lokalen Informationsangebotes unterstützt und die Integration der lokalen Informationsangebote in das Math-Net koordiniert.

Die Hauptziele des Projektes gliedern sich in die Bereiche

- *Informationsangebot*: Vervollständigung der lokalen Informationsserver, so dass sie alle relevanten Informationen der jeweiligen Institution enthalten.
- *Informationsstruktur*: Inhaltliche Strukturierung, Erschließung durch Metadaten und effiziente Organisation der lokalen Informationsangebote.
- *Informationsvermittlung*: Indexierung der lokalen Informationsserver zur Suche im gesamten lokalen Server, aber auch in bestimmten Teilmengen davon (z.B. nur Preprints).
- *Organisation der Informationsbereitstellung*: Vermittlung von Metadatenkenntnissen am Fachbereich und Erfassen von Metadaten für elektronische Dokumente. Organisatorische Neuregelung zur Bereitstellung des lokalen Informationsangebots.
- *Zentrales Archiv und Profildienst*: Automatisches Sammeln der lokalen Suchindexe in zentralen Komponenten (regional und bundesweit), die eine verteilte Suche über alle beteiligten Institutionen erlaubt. Eine Auswahl bestimmter Teilmengen (z.B. nur die Preprints aller beteiligten Institutionen) soll möglich sein. Profildienste, die die Teilnehmer automatisch über neue Dokumente in den Fachgebieten informieren, für die sie sich subscribieren können.
- *Math-Net-Links*: Aufbau eines Meta-Indexes mit Verweisen auf elektronische Informationsangebote der Mathematik in aller Welt, der Server von mathematischen Institutionen, Preprint-Archiven, Software-Sammlungen, Such-Indexen etc. nachweist und als Einstiegspunkt für die Mathematik in aller Welt dient.
- *Kooperationen und Öffentlichkeit*: Informationsveranstaltungen auf Fachbereichs- und auf Regionalebene, Präsentationen des Math-Net-Konzepts auf nationalen und internationalen Konferenzen.

Das Math-Net-Projekt hat in seiner zweijährigen Projektlaufzeit wesentliche Beiträge zum Aufbau einer funktionierenden elektronischen Informationsversorgung im Bereich der Mathematik in Deutschland geleistet.

Das Math-Net ist zwar für die Mathematik entwickelt worden, erhebt aber den Anspruch, ein Prototyp für elektronische Informationssysteme auch in anderen Wissenschaften zu sein. Die Einführung des Math-Net-Systems hat an den mathematischen Fachbereichen in Deutschland das Angebot von und den Zugang zu mathematischer Information nachhaltig verbessert.

Das Math-Net setzt auf die Eigenverantwortlichkeit der beteiligten Institutionen. Durch seine dezentrale Organisation ist es ein verteiltes System, bei dem die beteiligten Fachbereiche gefordert sind, ihr elektronisches Angebot öffentlich bereitzustellen und zwar nach einheitlichen Grundsätzen, die im Konsens vereinbart werden. Eine wichtige Rolle spielen hierbei die Informationsbeauftragten, die jede beteiligte Institution benennt und deren Aufgabe es ist, die Qualität des lokalen Informationsangebots inhaltlich und strukturell zu sichern. Die Informationsbeauftragten sind es auch, die die Organisationsabläufe in den beteiligten Institutionen an diesen Bedürfnissen ausrichten, koordinieren und neu regeln.

Der organisatorische Aspekt beim Aufbau eines IuK-Systems bedarf besonderer Aufmerksamkeit. Technische Probleme sind natürlich auch zu überwinden, nach unserer Erfahrung sind jedoch vor allem Anpassungen und Veränderungen im organisatorischen Umfeld wichtig. Dabei sind die Interessen und Belange aller relevanten Gruppen und Personen, vom Wissenschaftler über die Bibliothek bis hin zur Verwaltung und zur Technik zu berücksichtigen und zusammenzuführen.

Das Math-Net-Projekt hat mit seinem Netzwerk von Informationsbeauftragten einen Grundstein für eine personelle Infrastruktur im mathematischen IuK-Bereich in Deutschland geschaffen.

Dieses Netzwerk ist der Garant für die Stabilität und den Fortbestand des Math-Net. Es gewährleistet die Verwendung gemeinsamer Standards und Schnittstellen, die gegenseitige Befruchtung und Unterstützung im technischen Bereich, die Ausarbeitung gemeinsamer Empfehlungen und fördert auch den Wettbewerb untereinander.

Ein ebenso wichtiger Baustein für die Akzeptanz der durch das Math-Net-Projekt propagierten Verfahrensweisen und Neuregelungen war die frühzeitige Einbindung wichtiger nationaler und internationaler wissenschaftspolitischer Organisationen: Auf nationaler Ebene wurden Kooperationsverträge mit der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) und mit der Konferenz der mathematischen Fachbereiche in Deutschland (KMathF) geschlossen. Auf internationaler Ebene wurde mit der European Mathematical Society (EMS) und der International Mathematical Union (IMU) zusammengearbeitet. Daneben sind strategisch wichtige Kooperationen mit Bibliotheken und dem Zentralblatt für Mathematik vereinbart worden.

Besonders wichtige Ergebnisse dieser Aktivitäten sind die Gründung der Fachgruppe "Information und Kommunikation" der DMV (gemeinsam mit der ÖMG) und des "Committee for Electronic Information and Communication" (CEIC) der

IMU. Hier wird auf nationaler und internationaler Ebene das langfristige Bestehen des Math-Net gesichert. Ausbau und Fortentwicklung werden in internationaler Zusammenarbeit angestrebt.

Das Math-Net-Projekt hat aber auch im technischen Bereich wichtige Akzente gesetzt. Sehr frühzeitig wurden die Entwicklungen der Dublin Core (DC) Initiative aufgegriffen, im Projekt angewendet und gefördert. Das Math-Net war das erste Anwenderprojekt überhaupt, welches DC-Metadaten verwendete. Darauf aufbauend wurden vielfältige Suchdienste entwickelt, die heute innerhalb der Mathematik in Deutschland die besten und aktuellsten Ergebnisse liefern.

Die eigentliche Herausforderung ist aber sicherlich die Internationalisierung des Math-Net, d.h. die Ausdehnung der im Math-Net-Projekt entwickelten Konzepte, Methoden und Verfahren in einem globalen Kontext. Das erfordert den Ausbau sowohl der inhaltlichen, der technischen und auch der organisatorischen Komponenten des Math-Net. Sie haben im Rahmen des Math-Net-Projektes ein solides Fundament erhalten.

Das klare Ziel ist, die Math-Net Aktivitäten im Rahmen des CEIC international fortzusetzen und dabei ein globales IuK-System für die Mathematik zu entwickeln. Die am Math-Net beteiligten Institutionen werden daran mitarbeiten.

Publikationen

- [1] M. Grötschel, W. Dalitz (Hrsg.) *Math-Net Abschlussbericht*, Preprint SC 99-24, ZIB, 1999

3.2.3 Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Fachbereich Informatik der Universität Dortmund, Fachbereich Mathematik/Informatik der Universität Osnabrück

Förderung: BMBF im Rahmen des CARMEN-Projektes (AP7)

Informationssysteme und -dienste im Internet unterliegen einer stürmischen technischen Entwicklung. Relevante Information liegt im Internet häufig verteilt vor. Deshalb zählen

- die Strukturierung und Standardisierung von Daten und Metadaten
- das Zusammenführen von verteilten Daten,
- die Weiterverarbeitung von Daten (z.B. das Clustern inhaltlich eng zusammenhängender Dokumente) und
- die Präsentation und die Retrievalmöglichkeiten

zu den wichtigen aktuellen Forschungs- und Entwicklungsthemen in diesem Ge-

biet. Die mathematischen Fachbereiche in Deutschland haben mit dem Math-Net ein technisches und organisatorisches System für ein nutzergesteuertes IuK-System in der Mathematik entwickelt. Die mathematischen Informationangebote vor Ort stellen die Basis des Math-Net dar, aus der dann durch Akkumulation und Selektion spezielle Dienste aufgebaut werden. Als technische Hauptkomponente wird dafür derzeit die Public Domain Software Harvest eingesetzt. Harvest

- sucht vorgegebene lokale Systeme (Server) ab,
- filtert und "gathert" die lokalen Daten/Metadaten,
- konvertiert die Daten in ein spezifisches Datenformat (SOIF) und
- produziert daraus Indexdateien als Grundlage für das Retrieval,
- stellt Broker zur Abfrage der Daten/Metadaten zur Verfügung.

Die Math-Net-Dienste setzen dabei auf relativ flache Datenstrukturen auf. Im wesentlichen werden bibliographische Daten wie etwa der Titel oder der Autor eines Dokuments sowie der Volltext ausgewertet.

Aus dem Einsatz und den Erfahrungen mit dem Harvest System in wissenschaftlichen Informationssystemen wie Math-Net oder PhysNet haben sich konkrete Anforderungen bezüglich der Weiterentwicklung von Harvest ergeben.

Dazu zählen die Einbindung neuer Methoden und Formate, die die Basis für eine wesentlich weitreichendere inhaltliche Erschließung und Nutzung elektronischer Ressourcen darstellen:

- Resource Description Framework (RDF) und
- Extended Markup Language (XML)

RDF und XML setzen dabei auf die tiefere Strukturierung der Dokumente. Sie sind dabei flexibel, was die Anforderungen spezieller Nutzergruppen betrifft.

Ein weiteres Problem, das die zunehmende Internationalisierung an die elektronischen Informationssysteme stellt, ist die Forderung nach multilingualen Informationssystemen. Eine Voraussetzung dafür sind umfassende Character Sets, die es erlauben, die Symbole aller Schriften sowie der Sonderzeichen in den Wissenschaften in einheitlicher Form zu kodieren und dann auch darzustellen.

Zwei Standardisierungsinitiativen beschäftigen sich mit dieser Aufgabe, die die Systeme Unicode und Universal Character Set (UCS) entwickelt haben. Neben der Behandlung der Zeichen müssen multilinguale Informationssysteme alle Schwierigkeiten lösen, die durch Unterschiede in den Schriftsprachen hervorgerufen werden, wie z.B. unterschiedliche Schreibrichtungen, Markierungen von Wortgrenzen, etc. Multilinguale Informationssysteme befinden sich derzeit noch in einem frühen Stadium der Entwicklung.

Das bisherige für Math-Net benutzte Harvest System soll im Rahmen des Arbeitspakets 7 des Projekts CARMEN grundlegend überarbeitet und weiterentwickelt werden. Das Projekt hat am 01. Oktober 1999 begonnen, in den ersten beiden Projektmonaten wurde eine Spezifizierung der Anforderungsdefinition vorgenommen, insbesondere auch in Richtung auf eine mögliche multilinguale Erweiterung.

3.2.4 IuK-Initiativen von DMV und anderen wissenschaftlichen Fachgesellschaften

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: IuK-Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV), wissenschaftliche Fachgesellschaften in der IuK-Initiative

Die IuK-Fachgruppe der DMV hat im Berichtszeitraum ihre Arbeit erfolgreich fortgesetzt. So hat die IuK-Fachgruppe u.a.

- die Math-Net Aktivitäten auf der Sitzung der KMathF am 15.05.1999 in Dresden vorgestellt
- die Sitzung der Mathematik im Rahmen des “Workshops IuK99: Dynamic Documents”² der IuK-Initiative, 21.03.1999 Jena, in Kooperation mit dem Math-Net-Projekt organisiert
- den IuK-Nachmittag der Fachgruppe “Information und Kommunikation” im Rahmen der DMV-Jahrestagung 1999³ am 07.09.1999 in Mainz veranstaltet
- den IuK-Newsletter herausgegeben

Nach Auslaufen der Förderung für das Math-Net-Projekt hat die IuK-Fachgruppe die sehr anspruchsvolle Aufgabe der Fortführung der Math-Net-Aktivitäten übernommen. Dazu hat die Fachgruppe auf ihrer Sitzung im September eine Reihe konkreter Maßnahmen beschlossen:

- Aufbau einer MathNet Steering Group, die die künftigen Aktivitäten zum Ausbau des Math-Net in Deutschland koordinieren und steuern soll.
- Definition der Schwerpunkte der Arbeit der IuK-Fachgruppe, u.a.
 - Weiterentwicklung der Math-Net-Dienste (Ausbau und Ergänzung vorhandener Math-Net-Dienste, Entwicklung neuer Math-Net-Dienste, Dokumentation)
 - Fortführung der regionalen Arbeit
 - Ausbau der elektronischen Kommunikationsplattform durch Herausgabe eines zusätzlichen Math-Net Newsletters

²(<http://elib.zib.de/DMV-IuK/einladung.html>)

³(<http://www.mathematik.uni-mainz.de/DMV99/index.html>)

- Ausbau der Kooperationen: u.a. KMathF, fächerübergreifende Kooperation mit den Fachgesellschaften der IuK-Initiative, internationale Kooperation

Den Aktivitäten der IuK-Fachgruppe kommt durch die Internationalisierung der deutschen Math-Net-Aktivitäten durch die International Mathematical Union (IMU), die im Dezember auf dem Workshop "The Future of Mathematical Communication" beschlossen worden ist, eine wachsende Bedeutung zu.

Die DMV ist Gründungsmitglied der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften in Deutschland. Sie hat sich auch 1999 konstruktiv in die Ausgestaltung der IuK-Initiative eingebracht. Dazu zählen u.a.

- der Plenarvortrag zu Math-Net auf dem Workshop "IuK99: Dynamic Documents",
- die Mitarbeit der DMV im neugebildeten Executive Board der IuK-Kommission,
- die Pflege des Servers der IuK-Initiative,
- die federführende Gestaltung der Arbeitsgruppe "Metadaten und Klassifikation", u.a. Durchführung einer Sitzung der Arbeitsgruppe auf der Herbsttagung der IuK-Initiative in Blaubeuren, 08.- 09.11.1999,
- die Mitarbeit in internationalen Initiativen (wie etwa der DC-Initiative).

Die DMV hält die IuK-Initiative der Fachgesellschaften nach wie vor für wichtig und wird den Aufbau fachübergreifender Informationssysteme unterstützen.

Die Abteilung SIS des ZIB hat sich an weiteren IuK-Aktivitäten beteiligt, u.a. an der Diskussion um den Aufbau eines Berliner Wissenschaftsinformationssystems.

3.2.5 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: Carlos Saro, Beate Schröder, Regine Stein (ab Februar 1999), Christian Zimmer (bis März 1999), Ekaterina Atanassova, Doris Jung (ab Juli 1999)

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 Friedrichshagen (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.

Im Jahre 1999 wurden verstärkt vorhandene Datenbanken von Kooperationspartnern im Internet verfügbar gemacht.

Die bereits im Sommer 1996 eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen Historischen Museums⁴ wurde kontinuierlich verbessert und erweitert. Sie umfaßt inzwischen über 100.000 Datensätze mit etwa 60.000 digitalisierten Objektbildern. Sie bildet damit weiterhin das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Die Nutzung hat sich im letzten Jahr mit mehr als 1.000 Anfragen pro Woche mehr als verdoppelt. Als zusätzliches Angebot wurde ein Teil des Bildarchivs des Deutschen Historischen Museums mit einer Bestellmöglichkeit für einzelne Bilder⁵ im Internet verfügbar gemacht.

Für das Deutsche Hygiene Museum⁶ in Dresden wurde Ende 1999 ebenfalls ein Teil der Sammlung über das Internet zugänglich gemacht.

Am Institut für Museumskunde⁷ wurden 2 Bibliografien zu museumsspezifischen Themen verfügbar gemacht.

⁴(www.dhm.de/datenbank)

⁵(www.dhm.de/datenbank/bildarchiv.html)

⁶(<http://www.dhmd.de>)

⁷(<http://www.smb.spk-berlin.de/ifm>)

3.2.6 WWW-Labors für numerische Software

Bearbeitet von: Ulrich Nowak, Uwe Pöhle, Lutz Weimann

Die Arbeiten zur Erstellung virtueller Labore für numerische Software wurden fortgeführt. Im Berichtszeitraum konnten verbesserte Versionen des Labors für numerische Differentialgleichungslöser (ODELab) und des Labors für nichtlineare Gleichungslösungen (NLEQLab) bereitgestellt werden ⁸.

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), Andreas Dolzmann, Thomas Sturm (Universität Passau), Luis Alvarez, Caroline Cotter (Studenten der Universität Bath), 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 weltweiten Update). Im Berichtszeitraum wurde die Version REDUCE 3.7 fertiggestellt und freigegeben sowie die Dokumentation überarbeitet. Wesentliche Neuerungen sind die im Leistungsumfang stark erweiterten Versionen des REDUCE Logik Paketes REDLOG, des Differentialgleichungslösers CRACK und ein MathML-Interface. Ferner wurden neue Interfaces zu mathematischen Prozessoren wie z.B. der NTL Bibliothek erstellt und die Anzahl der unterstützten Plattformen um einige 64-bit Systeme erweitert. Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich 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>

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

oder <http://www.zib.de/Optimization/Software/Reduce>

Die Information wird im wesentlichen an der Universität zu Köln, am ZIB und bei RAND Corp. gepflegt. Der ZIB Anteil an der Präsentation des Systems wurde von Bettina Kasse vollständig überarbeitet und hat eine moderne Form erhalten. An der Umstellung der gesamten Information auf HTML bzw. Nachfolgeprodukten (wie OpenMath oder MathML) wird gearbeitet.

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

Im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft geförderten Projekts **Open-Math** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Erste Prototypen (einschließlich eines REDUCE-OM Prototyps) wurden in Zusammenarbeit mit Kollegen von INRIA Sophia-Antipolis im ZIB erstellt. Eine Fortführung dieser Arbeiten mit der University of Bath ist zu erwarten.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 73.000 DM erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat neben den Upgrades für die neue Version (seit Sommer 1999) 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] A. C. Hearn, *REDUCE User's and Contributed Packages Manual, Version 3.7*, Santa Monica, ZIB Preprint, 1999.

Computer Science

4.1 Computer Science Research

Der Aufbau der Ende 1998 neu etablierten Forschungsgruppe *Computer Science Research (CSR)* gestaltete sich schwieriger als zunächst angenommen. Dies nicht etwa aufgrund fehlender Ideen für anspruchsvolle, zukunftsweisende Forschungsthemen, sondern wegen des immer offensichtlicher werdenden eklatanten Mangels an qualifizierten Informatikern – ein Problem, das nun endlich von den Politikern erkannt und durch die Einführung von „Greencards“ für ausländische Computerspezialisten abgemildert werden soll. Diese Maßnahme dient allerdings primär der Förderung der Industrie, deren ausgefeilten Abwerbungsmaßnahmen die noch junge Forschungsgruppe CSR ohnehin bereits im ersten Jahr zu spüren bekommen hat: Anfang 1999 ist ein hochqualifizierter Mitarbeiter noch vor Abschluß seiner Promotion in die Medienbranche abgewandert. Zum Ausgleich haben wir kurz darauf einen hervorragenden neuen Mitarbeiter gewinnen können, der Ende 1999 mit einer Arbeit über werkzeuggestützte Modellierung moderner Systemarchitekturen [5] promoviert hat und nun tatkräftig am weiteren Aufbau der CSR-Gruppe mitwirkt. Trotz der offenen Stellen hat sich das ursprünglich geplante Forschungsspektrum, das von hardwarenahen Arbeiten an innovativen Kommunikationsnetzwerken bis zur effizienten Nutzung verteilter Supercomputer reicht, nur marginal geändert.

4.1.1 Innovative Netzwerke und Cluster-Systeme

Bearbeitet von: Alexander Reinefeld, Jens Simon

Kooperationspartner: FU-Berlin, Universität Klagenfurt, Paderborn Center for Parallel Computing, Fujitsu-Siemens AG, SCALI AS (Oslo), Dolphin Interconnects (Oslo)

Für die F&E-Arbeiten im Bereich “System Area Networks” ist in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Informatik der Freien Universität von Studenten ein kleiner *Beowulf*-Cluster installiert worden, der für Experimente mit innovativen Nachrichtenübertragungsprotokollen zur Verfügung steht. Der Cluster wird unter dem Betriebssystem Linux betrieben und für parallele Anwendungen sind die Kommunikationsbibliotheken MPICH und PVM installiert. Als nächste Ausbau-

stufe ist die Erweiterung um Gigabit-Ethernet-Karten geplant, auf denen das neue *Scheduled Transfer*-Protokoll laufen soll. Hier ist noch erheblicher Entwicklungsaufwand erforderlich, da für Scheduled Transfer derzeit lediglich Treiber für die teuren *Gigabit System Network*-Adapter verfügbar sind, nicht aber für das preiswerte Massenprodukt Gigabit-Ethernet.

Unsere Forschungsarbeiten zum *Scalable Coherent Interface (SCI)* [3] konnten nach intensiven Tests [4] erfolgreich abgeschlossen werden, die Ergebnisse sind in die Produktentwicklung der *hpcLine*, einem skalierbaren HPC-Cluster der Firma Fujitsu-Siemens eingeflossen und umgesetzt worden. Exemplarisch haben wir PVM an das SCI-Kommunikationsnetz angepaßt und optimiert [2]. Wir konnten damit zeigen, daß die Verwendung einer neuen Transport-Schicht mit effizienten Kommunikationsprotokollen eine deutliche Verbesserung der Kommunikationsbandbreite und Verringerung der Latenzzeit bewirkt. Dabei wurde der spezifische Vorteil von SCI des direkten Speicherzugriffs auf entfernten Speicher über das Netzwerk hinweg ausgenutzt.

Eine weitere Forschungsarbeit [1] beschäftigte sich mit Strategien und Algorithmen zum dynamischen Lastausgleich in Workstation-Clustern für industrielle Anwendungen der Auto-Crashsimulation. Hier wurde ein Checkpointing-System entwickelt, das automatisch langlaufende parallele Prozesse von einer Workstation auf eine andere transferiert, sobald ein Benutzer die betreffende Workstation interaktiv nutzen möchte. Bei der Berechnung des zukünftigen Mappings wird natürlich das Kommunikationsverhalten der parallelen Applikation berücksichtigt.

Publikationen

- [1] G.D. van Albada, J. Clinckemallie, A. Emmen, J. Gehring, O. Heinz, F. van der Linden, B.J. Overeinder, A. Reinefeld, P.M.A. Sloot, *Dynamite-Blasting Obstacles to Parallel Cluster Computing*. HPCN 1999, Amsterdam, pp. 300–310.
- [2] M. Fischer, A. Reinefeld, *PVM for SCI Clusters*. In: H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*, Springer LNCS 1734, (1999), pp. 239–248.
- [3] H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds.), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*. Springer State-of-the-Art Surveys LNCS 1734, 1999, ISBN 3-540-66696-6.
- [4] J. Simon, A. Reinefeld, O. Heinz, *Large-Scale SCI Clusters in Practice: Architecture and Performance*. In: H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*, Springer LNCS 1734, (1999), pp. 367–380.

- [5] J. Simon, *Werkzeugunterstützte effiziente Nutzung von Hochleistungsrechnern*. Dissertation, Universität-GH Paderborn, 1999.

4.1.2 Werkzeuge zur effizienten Nutzung verteilter Hochleistungsrechner

Bearbeitet von: Matthias Brune, Alexander Reinefeld, Hinnerk Stüben

Im Forschungsgebiet Metacomputing konnte ein Projekt zur effizienten Nutzung verteilter Supercomputer für das Arzneimitteldesign abgeschlossen werden: Das von der EU geförderte Bioinformatik-Projekt *PHASE* [3], an dem u.a. die Pharmaziefirmen Merck, Novo Nordisk und Oxford Molecular beteiligt waren, fand im März 1999 mit einem internationalen Workshop am ZIB seinen erfolgreichen Abschluß. Im PHASE-Projekt ist die Systemsoftware für einen virtuellen, verteilten Compute-Server entwickelt worden, die den Arzneimitteldesignern den transparenten Zugriff auf verteilte Supercomputer für ihre rechenzeitaufwendigen Anwendungen ermöglicht. Der Rechnerzugriff geschieht über benutzerfreundliche Web-Interfaces, ohne daß sich die Benutzer um die Verfügbarkeit, Auslastung oder Job-Plazierung ihrer Anwendung kümmern müssen.

Wesentliche Grundlage der PHASE-Software ist die universelle, graphenorientierte Beschreibungssprache *RSD* [1], die in Zukunft auch in einer erweiterten Form im deutschen Metacomputing-Projekt UNICORE eingesetzt werden soll. Während RSD primär zur effizienten Kopplung verteilter Computer auf Betriebssystemebene [4] dient, ist die Programmbibliothek *PLUS* [2] für die effiziente Kommunikation verteilter Anwendungen auf Programmebene entwickelt worden. Sie ermöglicht die Kommunikation paralleler Programme auf heterogenen Systemen, z.B. zwischen PVM und MPI.

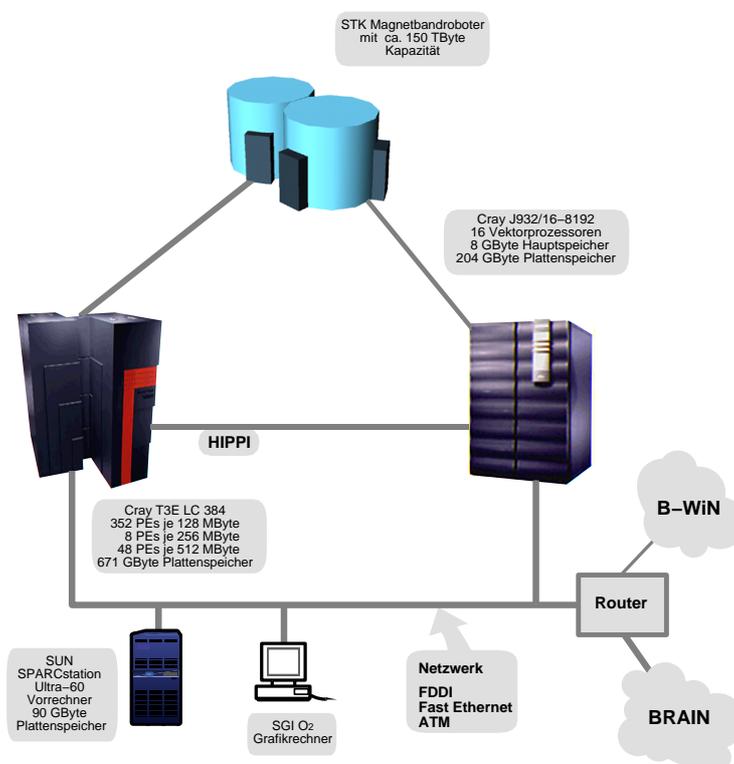
Auch für komplexe Anwendungen der Chemie wird das Metacomputing zunehmend relevant. Hier haben wir 1999 an der Initiierung eines neuen EU-Forschungsprogramms *METACHEM* zur Förderung von Projekten für das verteilte Supercomputing in der Chemie mitgewirkt. Unsere guten Forschungskontakte zu den amerikanischen Kollegen (z. B. des *Globus*-Projektes) waren bei der Ausarbeitung des Förderprogramms sehr hilfreich.

Publikationen

- [1] M. Brune, A. Reinefeld, J. Varnholt, *A Resource Description Environment for Distributed Computing Systems*. Procs. 8th International Symposium on High Performance Distributed Computing HPDC-8, Redondo Beach, CA, 1999, pp. 279–286.
- [2] M. Brune, J. Gehring, A. Reinefeld, *Linking Message Passing Environments*. In: Rajkumar Buyya (ed.), *High Performance Cluster Computing, Volume 2: Programming and Applications*, Prentice Hall, NJ, 1999, pp. 87–100.

- [3] R. Bywater, J. Gehring, A. Reinefeld, F. Rippmann, A. Weber, *Metacomputing in Practice: A Distributed Server for Pharmaceutical Industry*. Future Generation Computer Systems, Elsevier Publisher, Vol. 15, No. 5/6, 1999.
- [4] A. Keller, M. Brune, A. Reinefeld, *Resource Management for High-Performance PC-Clusters*. HPCN'99, Amsterdam, 12.–14.04.1999, pp. 270–280.

4.2 Hochleistungsrechner



Stand: Dezember 1999

ABBILDUNG 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner im ZIB

Der *Berliner Landeshochleistungsrechner* ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Es besteht aus dem Parallelrechner Cray T3E, dem Vektorrechner Cray J90 im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Hochleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbunds (NVV). Die Kon-

figurationsskizze in Abbildung 4.1 gibt einen Überblick der im ZIB betriebenen Rechnerkomponenten.

Von der allgemeinen *Y2k*-Hysterie im Zuge der Systemumstellungen auf das Jahr 2000 ist das ZIB verschont geblieben. Unsere Strategie zielte von Anfang an auf rechtzeitige Software-Upgrades sowie die Aufrechterhaltung eines durchgängigen Betriebs über die Jahreswende hinweg. Um eventuellen Stromausfällen zuvorzukommen, ist lediglich der Benutzerzugriff auf die Hochleistungsrechner in der Sylvesternacht eingeschränkt worden; die Systeme blieben jedoch am Netz. Dieses Vorgehen hat sich gut bewährt, da das ZIB dadurch von Hardwarefehlern durch thermische Effekte beim Ausschalten der Rechner – wie von einigen anderen Zentren berichtet – verschont blieb.

4.2.1 Systemkonfiguration

Parallelrechner Cray T3E

Um die gestiegene Nachfrage nach Hochleistungsrechenleistung abzudecken, wurde die Cray T3E im September 1999 von 256 (272)¹ Prozessoren um 128 (136) Prozessoren auf 384 (408) Prozessoren erweitert. Die neuen Prozessoren sind vom Typ *1200*, d.h. sie verfügen über eine Spitzenleistung von 1200 Mflop/s während die vorhandenen Prozessoren je 900 Mflop/s leisten. Von den neuen Prozessoren sind 48 mit einem größeren Hauptspeicher von je 512 MByte ausgestattet, die übrigen verfügen, wie auch die bisherigen, über je 128 MByte Hauptspeicher.

Der Umbau des Rechners konnte nach nur zwei Tagen Unterbrechung am 15. September erfolgreich abgeschlossen werden. Die erweiterte Rechenkapazität ist von den Benutzern vom ersten Tage an sofort vollständig ausgenutzt worden; der Betrieb des inhomogenen Systems verlief – nach entsprechender Anpassung des Systemsoftware, insbesondere des ZIB-Schedulers – von Anfang an völlig problemlos. Zusätzlich ist die Plattenperipherie um 240 GByte auf 671 GByte erweitert worden.

Der Parallelrechner Cray T3E des ZIB hat sich mit seiner theoretischen Spitzenleistung von 408 Gflop/s in den einschlägigen Übersichten über installierte Höchstleistungsrechner² nach den genannten Erweiterungen auf den fünften Platz in Deutschland verbessert, die davor liegenden Plätze werden von Rechnern beim Deutschen Wetterdienst, beim Forschungszentrum Jülich (NIC), bei der Max-Planck-Gesellschaft (RZ Garching) und bei der Universität Stuttgart eingenommen. International liegt die T3E des ZIB auf Rang 39.

Die Verfügbarkeit dieses Rechners hat sich gegenüber dem Jahr 1998 vor allem

¹Zahlen in Klammern enthalten auch Prozessoren mit besonderen Aufgaben, z. B. Command-PEs.

²Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer, Erich Strohmaier, *TOP500 Supercomputer Sites*, 13th Edition, <http://www.top500.org/top500.list.html>

	Parallelrechner <i>berte</i> Cray T3E LC 384	Vektorrechner <i>crassus</i> Cray J932/16-8192
Prozessoren	408 DEC Alpha EV5.6-21164	16 Cray J90
Taktfrequenz	272 PEs mit 450 MHz 136 PEs mit 600 MHz	100 MHz
Hauptspeicher	48 PEs mit je 512 MB 352 PEs mit je 128 MB 8 PEs mit je 256 MB	8 GB Shared Memory
Verbindungs- netzwerk	3-dimensionaler Torus	Y-MP
Transferrate	480 MB/s	51,2 GB/s
Bisections- bandbreite	122 GB/s	
Ein-/Ausgabe- Subsystem	3 GigaRinge	6 I/O Cluster 8 MB Pufferspeicher
Transferrate	≥ 1 GB/s	50 MB/s je I/O Cluster
Plattenspeicher	671 GB	204 GB
Transferrate	10–17 MB/s	7,2–12,4 MB/s
Anschlüsse für Bandlaufwerke	4 SCSI mit je 20 MB/s	4 Tape Channel Adapter mit je 20 MB/s
Netzanschlüsse	2 x HIPPI mit 100 MB/s ATM mit 19,4 MB/s FDDI mit 12,5 MB/s	HIPPI mit 100 MB/s FDDI mit 12,5 MB/s
theoretische Gesamtleistung	402 Gflop/s	3,2 Gflop/s

Tabelle 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner

	Vorrechner <i>ufer</i>	Grafikrechner <i>aventurin</i>
Zentraleinheit	Sun Ultra-60	SGI O ₂
Prozessoren	2 UltraSPARC-II	1 MIPS R5000
Taktfrequenz	360 MHz	180 MHz
Hauptspeicher	2 GB	256 MB
Plattenspeicher	90 GB	12 GB
Netzanschlüsse	Fast Ethernet mit 12,5 MB/s	Fast Ethernet mit 12,5 MB/s
sonstige Peripherie	CD-ROM	CD-ROM, DAT, Scanner, Videokamera

Tabelle 4.2: Konfiguration der Vorrechner

durch Erweiterungen im Betriebssystem UNICOS/mk verbessert; hervorzuheben ist die Eigenschaft, daß nunmehr einzelne Prozessoren separat wieder gestartet werden können, vorher war bei Ausfall eines Prozessors ein Restart des Gesamtsystems notwendig. Es traten nur noch 25 (im Vorjahr 54) außerplanmäßige Unterbrechungen auf, die Ausfallzeit betrug lediglich 112,7 h (im Vorjahr 229,6 h), das sind 1,3% (2,6%) der Kalenderzeit.

Vektorrechner Cray J90

Die Konfiguration des Vektorrechners (16 Prozessoren, Spitzenleistung 3,2 Gflop/s) blieb im Berichtszeitraum unverändert.

Aufgrund der mittlerweile nicht mehr adäquaten Prozessorleistung war dieses System im Jahr 1999 nur noch zu 52% ausgelastet. Da die Cray J90 jedoch über einen verhältnismäßig großen Hauptspeicher von 8 GByte verfügt, wurde sie hauptsächlich für Anwendungen mit einem großen Hauptspeicherbedarf genutzt. Als sogenannte UMA-Architektur (UMA = uniform memory access) ist der Hauptspeicher von allen 16 Prozessoren gleichermaßen schnell zugreifbar, was an einzelnen Tagen eine sehr geringe CPU-Auslastung (typischerweise wurden dann nur ein bis zwei CPUs genutzt) aber eine sehr hohe Speicherauslastung von teilweise über 90% zur Folge hatte.

Die Verfügbarkeit des Systems lag mit 1,5% Ausfallzeit, gemessen über die gesamte Kalenderzeit, vergleichsweise hoch.

Datenhaltungssystem STK 4400

Die Konfiguration des Datenhaltungssystems STK 4400 der Fa. StorageTek blieb im Berichtszeitraum unverändert. Ende des Jahres konnte mit dem Lieferanten eine Modernisierung des Systems vereinbart werden. Die Robotertechnik des Gerätes wird bei Beibehaltung beider Silos auf das verbesserte System STK 9310 (PowderHorn) umgerüstet, gleichzeitig werden zwei der Magnetbandgeräte (RedWood, SD-3-Technik) durch vier neu entwickelte Magnetbandgeräte vom Typ STK 9840 ersetzt werden. Bei dieser Technik werden in einem Spuraufzeichnungsverfahren 288 Spuren auf Band aufgezeichnet. Die Kapazität einer Kassette liegt zwar mit 20 GByte unterhalb der der SD-3-Technik (50 GByte), die Transferraten beider Magnetbandgeräte liegen bei 10 MByte/s, dafür ist die mittlere Zugriffszeit des neuen Magnetbandtyps mit 11 s erheblich besser als die entsprechenden Werte der RedWood-Technik mit 53 s mittlerer Zugriffszeit.

Den Benutzern der Hochleistungsrechner sowie für den hausinternen Datensicherungsdienst stehen mit Stand Dezember 1999 ca. 3500 Magnetbänder mit je 50 GByte (also ca. 130 TByte) zur Verfügung.

4.2.2 Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner liefern die Tabellen 4.3 und 4.4. Wegen der angespannten Haushaltssituation wurde auf die Beschaffung neuer kostenpflichtiger Produkte – mit Ausnahme des CFD-Programms FLUENT – verzichtet.

	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 10.0	Solaris 2.7	IRIX 6.5
System-Software	DMF 2.5 NQE 3.3	DMF 2.5 NQE 3.3		
Compiler	ANSI C 6.2 C++ 3.2 CF90 3.2 HPF 2.4 CAM 2.3	ANSI C 6.2 C++ 3.2 CF90 3.2	ANSI C 5.0 C++ 5.0 GCC 2.9 F77 5.0 F90 2.0 NAG F95 4.0	C 7.2 C++ 7.2 gcc 2.7 g++ 2.7 Fortran 77 7.2 Fortran 90 7.2
Tools	CrayTools 3.2 MPT 1.2 MPICH 1.1	CrayTools 3.2 MPT 1.1 MPICH 1.0 AIT 2.1	MPICH 1.1 PVM 3.3	MPICH 1.1
Numerik	CrayLibs 3.2 C++ Math 3.0 C++ Tools 3.0 Aztec 1.1 NAG FL 18	CrayLibs 3.2 Aztec 1.1 IMSL 3.0 NAG CL 3 NAG FL 18	Aztec 1.1 NAG CL 5 NAG FL 18 NAG F90 3 NAG TextWare	
Visualisierung	CVT 3.1	CVT 3.1 EnSight 6.2 GrADS 1.7 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS	EnSight 6.2 GrADS 1.7 Khoros 2.1 Mesa 2.4 NAG GL 4 NCAR 3.2 NewGKS SM 2.4 VTK 1.2	EnSight 6.2 GrADS 1.7 VTK 1.2
Ingenieurwissenschaften	FLUENT 5.0	ABAQUS 5.8 ADINA 6.1 FLUENT 5.0	ABAQUS 5.8	FLUENT 5.0 GAMBIT 1.0

Tabelle 4.3: Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner und Vorrechner

Parallelrechner CRAY T3E <i>berte</i>	Vektorrechner CRAY J90 <i>crassus</i>		
Ab-initio- Programme	Ab-initio- Programme	Semiempirische Programme	Kraftfeld- Programme
AMBER 5 DGAUSS 4.1 GAMESS (UK) 6.1 NWChem 3.2 TURBOMOLE 4 GAMESS (US)	ACESII 2.0 CADPAC 6.3 CRYSTAL 92 DGAUSS 4.1 GAMESS (UK) 5.2 GAMESS (US) Gaussian 94 D.2 MOLPRO 96	AMPAC 2.1 MNDO 94 MOPAC 6.02	GROMOS 96

Tabelle 4.4: Chemie-Pakete auf den Hochleistungsrechnern

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 1999 wurden im ZIB 78 Großprojekte aus den Gebieten Chemie, Ingenieurwissenschaften, Klimaforschung und Physik im Rahmen des NVV mit geeigneten Ressourcen versorgt. (Siehe auch URL: <http://www.zib.de/rz/zulassung>).

4.2.4 Großprojekte

Tabelle 4.5 zeigt die Verteilung der vom Zulassungsausschuß empfohlenen Großprojekte auf die Fachgebiete. Die Nutzung des Parallelrechners hat sich 1999 noch stärker in Richtung der Großprojekte konzentriert.

Insgesamt hat sich auch das Spektrum der Nutzerschaft vergrößert: Der Zulassungsausschuß hat im Berichtszeitraum neben 63 Projekten aus den Berliner Universitäten auch 8 Projekten von Universitäten aus den Neuen Ländern sowie 8 Projekten von sonstigen wissenschaftlichen Einrichtungen, vornehmlich aus den übrigen Ländern des zukünftigen HLRN-Verbundes, Rechenzeit im nennenswerten Umfang bewilligt. Ebenfalls im Vorgriff auf den HLRN-Verbund wurde einem Projekt der Universität Kiel aus dem Kontingent des Zulassungsausschusses au-

Herkunft	Biologie	Chemie	Geowiss.	Ingenieurwiss.	Physik	Summe
FU Berlin		3	5	1	7	16
HU Berlin	1	5	1		5	12
TU Berlin		17		11	7	35
Berlin, s.w.E. ^a	1	2			1	4
Bremen, s.w.E. ^a				1		1
Univ. Halle/Merseburg		2				2
Univ. Jena		1				1
Univ. Kiel					1	1
Univ. Leipzig					1	1
Univ. Potsdam				1		1
Potsdam, Golm, s.w.E. ^a			1		1	2
DESY Zeuthen					2	2
Summe	2	31	7	14	26	80

Tabelle 4.5: Verteilung der Großprojekte auf die Fachgebiete 1999

^asonstige wissenschaftliche Einrichtungen

ßerhalb des Kontingents des Landes Schleswig-Holstein Rechenkapazität bewilligt.

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugeteilten Rechenzeitkontingenten. Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Parallelrechnern (in Klammern jeweils die Werte aus den Jahren 1998 und 1997) nahmen die Fachgebiete Ingenieurwissenschaften mit 42% (33%, 37%) und Physik mit 37% (42%, 37%), gefolgt von den Fachgebieten Chemie mit 19% (9%, 7%) und Geowissenschaften mit 2% (16%, 19%) in Anspruch. Neu sind Projekte aus dem Fachgebiet Biologie, allerdings war im Berichtszeitraum der Rechenzeitverbrauch noch nicht nennenswert.

Den größten Rechenzeitverbrauch auf den Vektorrechnern (einschließlich der Nutzung der Rechner in Kiel und Hannover – in Klammern jeweils die Werte aus den Jahren 1998 und 1997) nahm das Fachgebiet Chemie mit 63% (55%, 50%), gefolgt von den Fachgebieten Physik mit 23% (17%, 36%), Ingenieurwissenschaften mit 9% (12%, 4%) und Geowissenschaften mit 5% (16%, 10%) 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 auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird zunehmend von anderen HPC-Zentren übernommen. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater⁴ des ZIB zugeordnet (siehe Tabelle 4.6).

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Dipl.-Math. Hans-Hermann Frese Dipl.-Math. Wilhelm Vortisch
Chemie	Dr. Detlef Reichardt Dr. Thomas Steinke
Informatik	Dr. Jens Simon
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Portierung und Optimierung	Dipl.-Ing. Klaus Ketelsen

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), Karlsruhe (SSC) und zukünftig München (HLRB);
- Diskussion der zugrundeliegenden Modelle und der eingesetzten Software;
- Mitarbeit bei der Entwicklung neuer Programme und Diskussion der zugrundeliegenden Algorithmen;
- Optimierung der Programme für die verwendeten Systeme;
- Auswahl, Installation und Pflege sowie Dokumentation von Anwendungssoftware.

Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung der Projekte.

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

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

4.3.1 Chemie

Der anteilige Rechenzeitverbrauch der Chemieprojekte auf dem Parallelrechner Cray T3E hat sich im Berichtszeitraum im Vergleich zum Vorjahr auf 19% verdoppelt. Dazu trug hardwaremäßig der Ausbau des Rechnersystems mit Knoten bei, die über einen lokalen Speicher von 512 MB verfügen. Davon können insbesondere Programme wie *TURBOMOLE* profitieren. Die Migration von Anwenderprojekten vom Vektorrechner auf den Parallelrechner und die Gewinnung neuer Projekte wurde sowohl durch die Bereitstellung verbesserter Versionen der Produktionspakete *TURBOMOLE* und *DGauss* als auch durch Neuinstallationen wie *GAMESS (US)* durch die beiden Fachberater unterstützt.

Wesentlichen Anteil an der Nutzung des Parallelrechners hatten Coupled-Cluster-Rechnungen von molekularen Systemen mit *NWChem*, die bislang nicht auf dem Vektorrechner durchführbar waren. Die aktuelle Installation erlaubt die routinemäßige Berechnung von Korrelationsbeiträgen für Moleküle mit z. B. jeweils 80 besetzten und virtuellen Orbitalen⁵.

Trotz der weiteren Migration von Anwenderprojekten zum MPP-System dominierten die Chemieprojekte unverändert die Produktion auf dem Vektorrechner Cray J90, vornehmlich aus Gründen der verfügbaren Software (*Gaussian*, *MOLPRO*) und des nutzbaren Speicherplatzes von bis zu 7 GB.

Kooperationen

In Zusammenarbeit mit den *UniChem*-Entwicklern bei Oxford Molecular Inc. (USA) konnten weitere Verbesserungen in die Produktionsversion *DGauss 4.1* und die β -Version *DGauss 5* für Cray T3E einfließen. *DGauss* wird jetzt praktisch ausschließlich auf dem Parallelrechner eingesetzt.

Mit den Programmautoren von *GAMESS-UK*, Martyn Guest und Paul Sherwood (Daresbury Lab, UK), wurde ein Ausbau der bisherigen Kooperation vereinbart. Begonnen wurde eine engere Zusammenarbeit im Bereich Metacomputing. Am ZIB wird *GAMESS-UK* im Rahmen des Gigabit-Testbeds Süd+Berlin um Komponenten für Metacomputing ergänzt (s. 4.6.4). Der Ausbau der Kooperation auf die Gebiete Application Steering und Ressourcenmanagement ist geplant.

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 vom Zulassungsausschuß bewilligten Projekte hat sich zwar leicht erhöht, deren verbrauchte Re-

⁵Genauer: das die Problemgröße bestimmende Produkt der Quadrate der besetzten (N_{occ}) und der virtuellen (N_{virt}) Orbitalen liegt dann bei $N_{occ}^2 \cdot N_{virt}^2 \approx 7000$.

chenzeit hat jedoch insbesondere auf dem Parallelrechner stark abgenommen. Berücksichtigt man auch diejenigen Projekte, die über die NVV-Partnerkontingente am ZIB rechnen, so ist der Rechenzeitanteil des Fachgebietes auf dem Parallelrechner mit 15% praktisch konstant geblieben. Dies reflektiert auch das für die norddeutschen Küstenländer typische Anwendungsprofil, dessen Verstärkung wir für das Jahr 2000 durch weitere Projekte aus dem HLRN-Verbund erwarten, die Kontingent über den Zulassungsausschuß beantragen.

Zu den größten Rechenzeitabnehmern auf dem Parallelrechner gehören Projekte, die das am ZIB portierte Ozean-Modell *MOM* einsetzen. Der *MOM*-Code wird auch im Rahmen des HLRN eine herausragende Rolle spielen, da eine Reihe von Projekten diesen Code auch auf dem HLRN-Rechner einsetzen will.

4.3.3 Ingenieurwissenschaften

Der Anteil der abgenommenen Rechenzeit ist für das Fachgebiet auf dem Parallelrechner deutlich gestiegen (von 33% auf 42%), während die Nutzung des Vektorrechners abgenommen hat (von 12% auf 9%). Die Projekte aus den Ingenieurwissenschaften lassen sich in zwei Gruppen einteilen.

Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) benutzen mittlerweile fast ausschließlich den Parallelrechner und arbeiten mit selbstgeschriebenen Forschungscode. Der aerodynamische Entwurfscode *FLOWer* wird seit seiner Portierung auf den Rechner Cray T3E (1997) beständig und erfolgreich für Produktionsläufe mit bis zu 6,8 Mio. Punkten auf 129 Prozessoren eingesetzt. Für den strömungsmechanischen Bereich konnte im Berichtszeitraum der kommerzielle CFD-Code *Fluent* beschafft und sowohl auf dem Parallelrechner als auch auf dem Vektorrechner bereitgestellt werden. Das Pre- und Postprocessing kann auf dem Grafikrechner *aventurin* auch über das Netz abgewickelt werden.

Die Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich benutzen die kommerziellen Pakete *ABAQUS* und *ADINA*, sie werden auf dem Vektorrechner bearbeitet. Die Nutzung von *ABAQUS* hat im Berichtszeitraum derart zugenommen (Anzahl der Projekte und abgenommene Rechenzeit), daß der Umfang der Lizenz zur Vermeidung längerer Engpaßsituationen erweitert werden mußte.

Forschung und Lehre

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 das Interesse des Fachberaters der Unterstützung der Projekte durch Nutzbarmachung neuerer Methoden und Konzepte, wie z. B. die interaktive, netz-

verteilte Simulation und Visualisierung.

Im Ausbildungsbereich engagiert sich der Fachberater in der Durchführung von Kursen (MPI-Kurs in Kiel) und in Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel Computing*).

4.3.4 Physik

Die Zahl der 1999 bearbeiteten Großprojekte aus dem Bereich Physik liegt mit 25 im Rahmen der vorangegangenen Jahre. Diese Projekte haben 37% der auf der Cray T3E des ZIB abgegebenen Rechenzeit verbraucht. Von dieser Rechenzeit verbrauchten Projekte aus Berlin 62%, aus Niedersachsen 20%, aus Schleswig-Holstein 16% und 2% andere. Die von Physikern auf dem Vektorrechner des ZIB in Anspruch genommene Zeit entspricht weniger als 2% der auf dem Parallelrechner verbrauchten Zeit. Damit kann für den Bereich Physik die Migration vom Vektor- zum Parallelrechner als abgeschlossen angesehen werden.

Diesem Überblick über die Entwicklung der Physikprojekte folgt ein kurzer Bericht über die wissenschaftlichen Aktivitäten des Fachberaters.

Gitterfeldtheorie

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Volkard Linke (Freie Universität Berlin); Ernst-Michael Ilgenfritz (Kanazawa University, Japan); Werner Kerler, Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin); Gerrit Schierholz (DESY Zeuthen)

Das wissenschaftliche Arbeitsgebiet des Fachberaters Physik ist die Gitterfeldtheorie. In diesem Gebiet werden Untersuchungen zur Theorie der Elementarteilchen mit Hilfe von Computersimulationen durchgeführt. Derartige Untersuchungen gehören zu den Grand Challenges des Supercomputings.

Schwerpunkt der Aktivitäten war in diesem Jahr die Untersuchung des parallelen Temperings als mögliche Verbesserung für Simulation der Quantenchromodynamik (QCD). Paralleles Tempering ist ein erweitertes Monte-Carlo-Verfahren, das in der Statistischen Physik erfolgreich eingesetzt wurde, um das Tunneln durch hohe Energiebarrieren zu beschleunigen. Im Hinblick auf die QCD ist die Methode vielversprechend, um das Tunneln zwischen den topologischen Sektoren zu beschleunigen. Bisher ist dies für die Simulation kleiner Systeme gelungen. Um Vorhersagen über die Beschleunigung in realistisch großen Systemen zu bekommen, werden zur Zeit Rechnungen auf Gittern mittlerer Größe durchgeführt.

Publikationen

- [1] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson und H. Stüben, *Mass Spectrum and Decay Constants in the Continuum Limit* Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 73 (1999), 237–239.
- [2] E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler und H. Stüben, *Decorrelation of the topological charge in tempered Hybrid Monte Carlo simulations of QCD*, Preprint SC 99–28, ZIB, 1999.
- [3] H. Stüben, *Decorrelation of the Topological Charge in Tempered Simulations of Full QCD*, Preprint SC 99–47, ZIB, 1999.

4.4 Interne Rechenzentrumsdienste

Die Aufgabe der Abteilung Interne Rechenzentrumsdienste (IRZ) liegt in der Pflege und Weiterentwicklung der informationstechnischen Infrastruktur des ZIB. Dazu gehört die Planung, Beschaffung und Erhaltung der Ausstattung mit Software und Geräten der Kommunikations- und Informationstechnik. Darüberhinaus hat die Abteilung in diesem Jahr ein weiteres technisch-wissenschaftliches Projekt mit Drittmittelförderung in Angriff genommen. Neben dem Projekt der *Sprachübertragung im B-WiN* wurde das Projekt *Güte* begonnen, das sich mit Techniken der Datenübertragung bis 2,4 Gb/s befaßt.

Am ZIB werden überwiegend Workstations der Firmen SUN und SGI sowie PCs mit Intel Pentium Prozessoren betrieben. Von der viel-gefürchteten Jahr-2000-Problematik sind die im ZIB installierten Workstations und PCs, wie auch Hochleistungsrechner (s. Kapitel 4.2), verschont geblieben.

4.5 Sicherheit

Die Sicherheit von Rechnern und den Zugängen über Netze ist ein Gebiet, dem auch im Jahr 1999 erhöhte Aufmerksamkeit gewidmet werden mußte. Mit dem weiteren extremen Wachstum des Internet und der Bereitstellung einfach zu nutzender „Hackertools“ sind mehr Angriffe auf Rechner und Netzzugänge in höherer Qualität als in den Vorjahren zu verzeichnen.

Die Arbeit der Sicherheitsbeauftragten liegt im Spannungsfeld der Gewährleistung eines einfachen Zugriffs berechtigter Nutzer auf die Systeme des ZIB und der Verhinderung eines möglichen Mißbrauchs. Letzterer wird durch regelmäßige Paßwort-Checks, Tools zur Auswahl sicherer Paßworte (*chkpw*) und die Einführung des *Secure Shell*-Zugangs (*ssh*) zu den Hochlei-

stungsrechnern sichergestellt. Wurde in den Jahren zuvor *ssh* als Tool lediglich optional angeboten, so ist die Verwendung von *ssh* nun bindend, damit keine Daten mehr unverschlüsselt über das Netz geschickt werden.

Für Emails wird das Verschlüsselungsprogramm PGP zur Verfügung gestellt. Für den Einsatz von PGP müssen beide Mailpartner ein Schlüsselpaar erzeugen und die öffentlichen Schlüssel, die jedem bekannt sein können, austauschen. Danach können die Mailpartner ihre E-Mails mit Hilfe von PGP verschlüsseln und/oder signieren. Die Signatur gibt dem Mailpartner die Garantie, daß die Nachricht tatsächlich von dem Benutzer stammt, der den Schlüssel erzeugt hat, und daß sie unterwegs nicht verändert wurde. Die öffentlichen Schlüssel können über unsere WEB-Seiten abgefragt werden.

Zusätzlich wurde am ZIB eine Zertifizierungsstelle eingerichtet, die nach der Politik der DFN-PCA (Zertifizierungsinstanz für das Deutsche Forschungsnetz) arbeitet. Ist ein Schlüssel mit diesem Zertifikat versehen, ist das eine elektronische Beglaubigung, daß der Schlüssel zu dem Benutzer gehört. Genauere Informationen zu der Zertifizierungsstelle des ZIB sind unter <http://www.zib.de/ca/> zu finden.

4.6 Weitere Projekte des Bereiches Computer Science

4.6.1 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

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

Das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN (Berlin Research Area Information Network) verbindet z. Zt. 61 Wissenschaftseinrichtungen in der Stadt und stellt für diese den Anschluß an das B-WiN (das Breitband-Wissenschaftsnetz des DFN-Vereins) und an das Internet her (vgl. Abbildung 4.2).

Basis der lokalen Netzinfrastruktur ist das BRAIN-Kernnetz, welches die Universitäten FU Berlin, HU Berlin, TU Berlin sowie das Konrad-Zuse-Zentrum miteinander verbindet. Über die vier Kernnetzstandorte werden alle weiteren wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin an das LWL-Netz von BRAIN angeschlossen. Darüber hinaus wird BRAIN von einigen wissenschaftlichen Einrichtungen auch zur internen Vernetzung ihrer in der Stadt verteilten Standorte genutzt.

Nachdem im Jahr 1998 der Berliner B-WiN-Anschluß seine Kapazitätsgrenze von 155 Mb/s erreicht hatte, konnte im Jahre 1999 durch Koppelung zweier B-WiN-Hauptanschlüsse (in der FU Berlin und in der Universität Potsdam) die von den Berliner Teilnehmern genutzte Bandbreite auf 234 Mb/s erhöht und das Netz

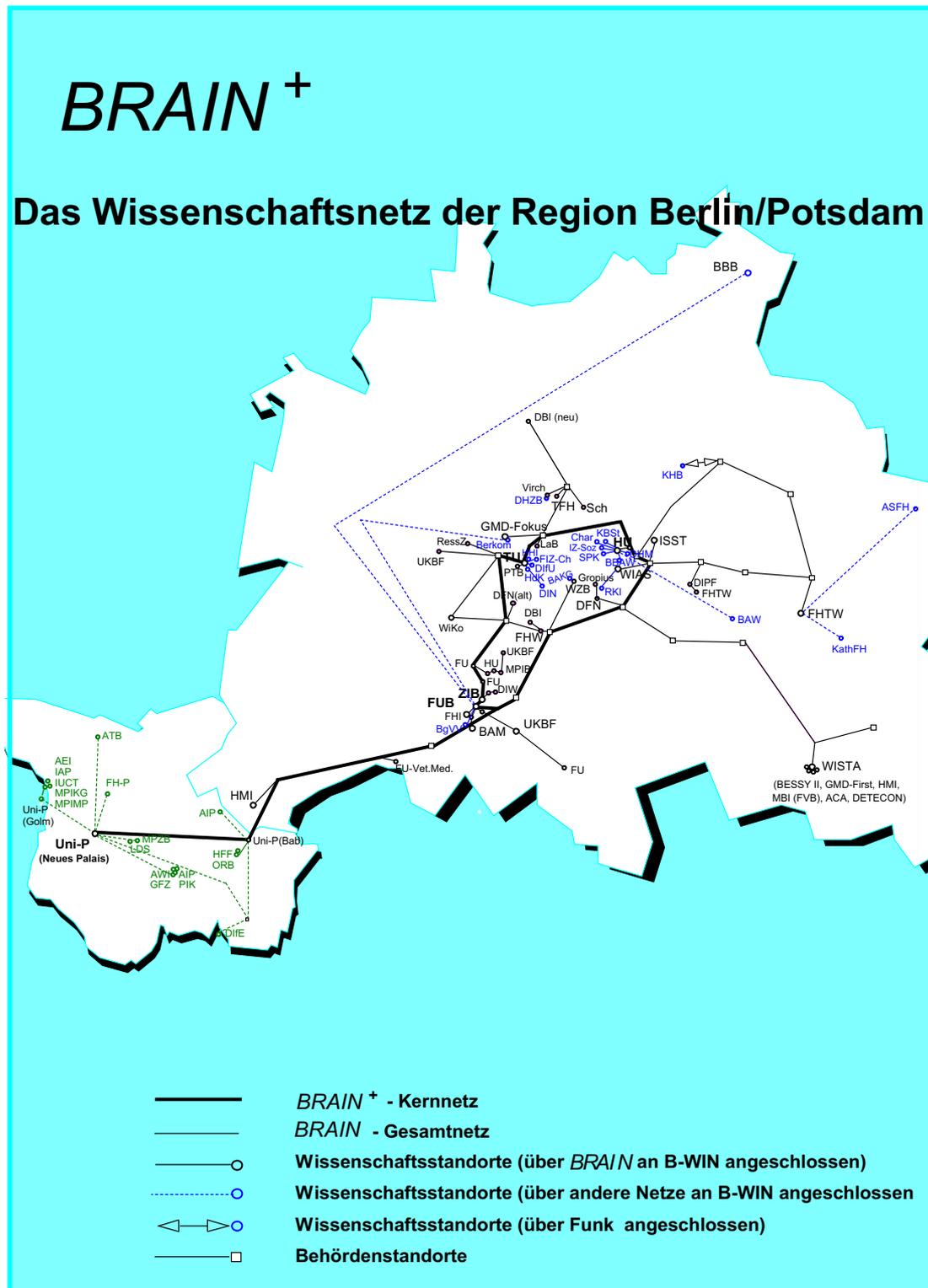


ABBILDUNG 4.2: BRAIN⁺: Das Wissenschaftsnetz der Region Berlin/Potsdam

weiter ausgebaut werden.

Die Schwerpunkte für 1999 waren im Einzelnen:

- Verknüpfung der Wissenschaftsnetze von Berlin und Potsdam
- Anschluß weiterer Einrichtungen an BRAIN; Erweiterung des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT
- Änderung der Verwaltungsvereinbarung des Senats und Bereitstellung eines Anteils am MAN für BRAIN
- Vorbereitungen für das G-WiN des DFN-Vereins.

Verknüpfung der Wissenschaftsnetze von Berlin und Potsdam.

Am 25. März 1999 konnte in einer feierlichen Eröffnung die Verbindungsstrecke zwischen BRAIN und dem Potsdamer MAN (P-MAN) in Betrieb genommen werden. Vorangegangen war ein Beschluß des Koordinierungsrates der Länder Berlin und Brandenburg, der die Verknüpfung beider Netze empfohlen hatte. Die Abbildung 4.3 zeigt, wie der Minister für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg, Herr Steffen Reiche (links) und der Staatssekretär für Wissenschaft und Forschung des Landes Berlin, Herr Prof. Dr. Ingolf V. Hertel (rechts) gemeinsam unter Anleitung des Vizepräsidenten des ZIB, Herrn Prof. Dr. Martin Grötschel die Lichtwellenleiter zusammenstecken und damit der Verbindung beider Netze herstellen. In der gleichen Veranstaltung wurde vom Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung und Forschung, Herrn Dr.-Ing. h.c. Uwe Thomas (nicht im Bild), die Erweiterung des Gigabit-Testbeds Süd von München über Erlangen nach Berlin in Betrieb genommen (vgl. Abschnitt 4.6.2). Durch die Koppelung werden die in Potsdam gelegenen Hochschulen und Forschungseinrichtungen mit den entsprechenden Einrichtungen auf Berliner Gebiet direkt verbunden. Damit können Anforderungen der Wissenschaftler nach höheren Bandbreiten zwischen ihren Institutionen jetzt in gleicher Weise in der Region realisiert werden, wie es schon seit längerer Zeit zwischen den Berliner Einrichtungen üblich ist.

Von der Verbindung der beiden Netze profitieren alle Wissenschaftseinrichtungen. Da seit der Koppelung für alle Einrichtungen gemeinsam zwei Hauptanschlüsse zu je 155 Mb/s zur Verfügung stehen, konnten auf Berliner Seite die vorher bestehenden Engpässe beseitigt werden und weitere Einrichtungen am B-WiN-Gemeinschaftsanschluß teilnehmen, bzw. es konnten Einrichtungen ihre Anschlußkapazität am B-WiN erhöhen. Durch die gemeinsame Nutzung beider Hauptanschlüsse wird außerdem eine höhere Verfügbarkeit erreicht, da bei Ausfall der Infrastruktur an einem Hauptanschluß automatisch die Datenströme über den jeweils anderen geroutet werden.



ABBILDUNG 4.3: Minister Reiche, Vizepräsident Grötschel, Staatssekretär Hertel bei der feierlichen Inbetriebnahme der Verbindungsstrecke Berlin-Brandenburg (von links nach rechts)

Die vom LIT neu errichtete Kabelstrecke zwischen den beiden Netzen führt vom Rathaus Wannsee über Steinstücken zum – unmittelbar an der Stadtgrenze gelegenen – Standort III der Universität Potsdam in Babelsberg. An den Baukosten haben sich auch die Max-Planck-Gesellschaft und die Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften beteiligt.

Anschluß weiterer Einrichtungen an BRAIN und Erweiterung des Glasfasernetzes in Zusammenarbeit mit dem LIT.

Die technische Grundlage von BRAIN ist das Lichtwellenleiter-Netz des Landes Berlin, welches vom Landesbetrieb für Informationstechnik LIT für die Behördenstandorte sowie – in Zusammenarbeit mit den Wissenschaftseinrichtungen – für die Wissenschaftseinrichtungen in weitgehend vorhandenen Kabelschächten im öffentlichen Straßenland verlegt ist. Im Jahre 1999 konnte das Glasfasernetz von BRAIN wiederum um ca. 17 km erweitert werden. Die Erweiterungen waren zum Teil (DFN-Geschäftsstelle, Deutsches Bibliotheksinstitut DBI) durch Umzüge von BRAIN-Teilnehmern an andere Standorte in der Stadt veranlaßt. Neue LWL-Anschlüsse an BRAIN wurden gebaut für:

- Nebenstandort der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft
- Bildungsgeschichtliche Bibliothek des Deutschen Instituts für Internationale

Pädagogische Forschung

- Walter-Gropius-Bau
- Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften
- Wissenschaftsforum am Gendarmenmarkt.

Wie in den vergangenen Jahren wurden sämtliche Erweiterungsstrecken von den daran interessierten Wissenschaftseinrichtungen finanziert und vom LIT bzw. unter der Verantwortung des LIT hergestellt.

Änderung der Verwaltungsvereinbarung des Senats über die Bereitstellung von Glasfasern aus dem Berliner Landesnetz

Die Bereitstellung und Nutzung der BRAIN-LWL – welche physikalisch als Teil des Berliner Landesnetzes gelten – erfolgt auf der Basis einer im Jahre 1995 abgeschlossenen Verwaltungsvereinbarung zwischen der Senatsverwaltung für Wissenschaft (vertreten durch das ZIB) und der Senatsverwaltung für Inneres (vertreten durch das Landesamt für Informationstechnik LIT). Nachdem das LIT in einen Landesbetrieb für Informationstechnik umgewandelt und in seiner Funktion und Arbeitsweise vollkommen neu strukturiert worden war, mußte auch die Verwaltungsvereinbarung in einigen Teilen modifiziert werden.

Als wichtigste Änderung wurde neu vereinbart, daß ab dem Jahre 1999 Faserstrecken mit einer Gesamtlänge von etwa 2.000 km bei voller Wartung gegen Entgelt vom LIT an BRAIN zur Nutzung überlassen werden. Die hierfür erforderlichen Mittel werden vom Land Berlin zentral finanziert.

Vorbereitungen für das G-WiN

Im DFN-Verein war beschlossen worden, das jetzt bestehende Breitband-Wissenschaftsnetz B-WiN im Jahr 2000 in ein Gigabit-Netz G-WiN zu überführen. Anders als im B-WiN wird es dann keine Gemeinschaftsanschlüsse mehr geben. Statt dessen wird jeder Kunden-Anschluß über einen der bundesweit ca. 30 Kernknoten vor Ort versorgt (und zwar zu finanziell gleichen Bedingungen, unabhängig davon, wo der jeweilige Nutzer sich befindet). Der G-WiN-Kernknoten für die Region (d.h. für Berlin und den größeren Teil Brandenburgs, sowie über Level-2-Knoten auch Mecklenburg-Vorpommern und Sachsen-Anhalt) wird im ZIB untergebracht. Der DFN-Verein wird dort die für den Kernknotenbereich erforderlichen Geräte aufstellen und in eigener Regie betreiben. Die Anbindung der einzelnen G-WiN-Teilnehmer im Raum Berlin wird, wo immer es möglich ist, über BRAIN-Fasern erfolgen, die vom DFN zu diesem Zwecke angemietet werden.

Mit der Umgestaltung des DFN-Wissenschaftsnetzes sind auf lokaler Ebene weitreichende technische und organisatorische Veränderungen verbunden. Die unter B-WiN mögliche und beim Berliner Gemeinschaftsanschluß verwirklichte Ringstruktur mit einem Kernnetz, von welchem aus die Wissenschaftseinrichtungen

dezentral angeschlossen sind, wird beim G-WiN grundsätzlich aufgegeben zu Gunsten einer reinen Sternstruktur. Jede einzelne wissenschaftliche Einrichtung wird als G-WiN-Teilnehmer über dedizierte Fasern und mittels SDH-Technik bis an den Kernknoten im ZIB herangeführt. Hauptsächlicher Nachteil dieser Konstruktion ist der Fortfall der Backup-Verbindungen zwischen den Kernstandorten FUB, HU, TUB und ZIB. Da das Kernnetz auf der Leitungsebene jedoch ringförmig angelegt ist und bleibt, lag es nahe, durch ein darüber gelegtes – ebenfalls ringförmig angelegtes – virtuelles Netz sich die Vorteile von Backup-Verbindungen zu erhalten. Die dadurch erzielte höhere Verfügbarkeit des Netzes soll natürlich auch dem überregionalen G-WiN-Verkehr zu Gute kommen. Voraussichtlich wird der DFN die lokale Ringstruktur zusätzlich installieren nach Maßgabe einer Vereinbarung, in welcher auch günstigere Tarif-Bedingungen für den regionalen IP-Verkehr vorgesehen sind.

Die veränderten Umstände machen auch eine Neuorientierung für Classical BRAIN als dem regionalen Berliner Wissenschaftsnetz erforderlich. Sicher ist, daß die gekoppelten Netze von BRAIN und des Potsdamer MAN weiterhin eine besondere regionale Funktion haben werden. Auf eigenen Fasern und komplementär zum G-WiN sollen darüber verstärkt solche Dienste angeboten werden, die entweder in den Regelleistungen des G-WiN nicht enthalten sind (wie z. B. ATM), oder die als besondere Anwendungen (z. B. Multimedia-Dienste, Teleteaching, Verteiltes Rechnen) über ein lokales Netz günstiger erbracht werden können. Zunehmen wird auch die Bedeutung des regionalen Netzes als Zubringer- und Verkehrsnetz für wissenschaftliche Einrichtungen mit verteilten Standorten in der Region.

4.6.2 Gigabit-Testbed Projekt „KoMaB“

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Kooperationspartner: DFN-Verein, BMBF, Deutsche Telekom

Seit 1997 führt der DFN-Verein mit Fördergeldern des BMBF und der Telekom Projekte durch, um die nach B-WiN nächste Stufe der Hochgeschwindigkeitskommunikation in Deutschland und den Einsatz neuer Netztechnologien vorzubereiten. Das im Jahre 1998 eingerichtete Gigabit-Testbed Süd, in welchem der Austausch großer Datenmengen zwischen räumlich weit entfernten wissenschaftlichen Einrichtungen erprobt wird, wurde nach Berlin hin erweitert und 1999 in Betrieb genommen. Die an Gigabit-Projekten beteiligten Einrichtungen aus der Region Berlin/Potsdam sind über ca. 100 km lange Glasfaserkabel in der Region mit dem Berlin Aufpunkt in der TU verbunden. Eine Liste sämtlicher Projekte befindet sich unter <http://www.dfn.de/projekte/gigabit/gtb-sued.html>. Im Teilprojekt KoMaB (Koordinierungs-Management Berlin) werden die in Berlin und Potsdam tätigen Anwendungsprojekte aus dem Gigabit-Testbed Projekt des DFN betreut. Zu den Aufgaben von KoMaB gehören insbesondere:

- die für das Gigabit-Testbed vorgesehenen Faserverbindungen aus dem Netz

- von BRAIN zur Verfügung zu stellen und zu verwalten, sowie als Verbindungsstelle zum LIT – dem Betreiber des MAN – zu dienen;
- die für alle Teilprojekte wichtigen Informationen zu sammeln und sie auf dem Server der BRAIN-Geschäftsstelle bereitzuhalten;
 - die Kommunikation unter den Projektteilnehmern in Berlin, zwischen Berlin und Bayern, sowie zur DFN-Geschäftsstelle zu fördern (z. B. durch Einrichtung und Pflege diverser Mailinglisten);
 - die Organisation von Veranstaltungen für die Projektteilnehmer aus der Region; Unterstützung der DFN-Geschäftsstelle bei der Durchführung überregionaler Veranstaltungen.

4.6.3 Gigabit-Testbed Projekt „GÜTE“

Bearbeitet von: Wolfgang Pyszkalski, Manfred Lauter, Dirk Krickel, Rainer Wesel

Kooperationspartner: EANTC der TU Berlin, Telekom und weitere

Im Rahmen des Projekts GÜTE werden allen Anwendungsprojekten des Gigabit-Testbed-Projekts Süd+Berlin in der Region Berlin/Potsdam Unterstützung bei ihren Projekten gegeben. Schwerpunkt im Berichtszeitraum war die Inbetriebnahme des Netzes beginnend bei Messungen bzgl. der Qualitätssicherung der bereitgestellten Lichtwellenleiter, Bereitstellung von ATM-Switchen und IP-Routern, Absprachen von Adressen und Durchführen von Durchsatzmessungen.

Die beiden ersten Meilensteinberichte „Aufbau und Betriebsaufnahme“ und „Evaluation der Netzwerktechniken“ liegen zur Zeit vor, sind jedoch noch nicht in vollem Umfang vom Drittmittelgeber Telekom zur Veröffentlichung freigegeben. Informationen über das Projekt sind unter <http://guete.zib.de> verfügbar.

Als ein technischer Teil des Projektes wurden die exklusiv für das Projekt zur Verfügung gestellten Lichtwellenleiter (LWL) in Berlin und Potsdam vermessen. Diese Messungen dienten der Qualitätssicherung und wurden mittels eines dafür beschafften Rückstreuemeßgerätes (ODTR) vom Typ WG OFT50 durchgeführt.

Abbildung 4.4 zeigt eine typische Anzeige der Messungen eines Leitungspaars über eine Entfernung von 40 km. Die obere Kurve zeigt bei km 20 ein erhebliches Problem. Bei feinerer Auflösung und unter Heranziehung der physikalischen Netzstruktur kann man Problemstellen sehr genau lokalisieren.

Neben dem primären Ziel der Beseitigung von Fehlern und der Erstellung einer Dokumentation mit Referenzmeßwerten ergaben sich noch weitere positive Effekte. Wir besitzen jetzt nicht nur ein Meßgerät, sondern auch das noch viel wichtigere Wissen, um in unserem wissenschaftlichen Umfeld bei auftretenden Problemen mit Lichtwellenleitern hilfreich tätig werden zu können. Viele der auftretenden Probleme äußern sich nicht in einem Totalausfall der Verbindung,

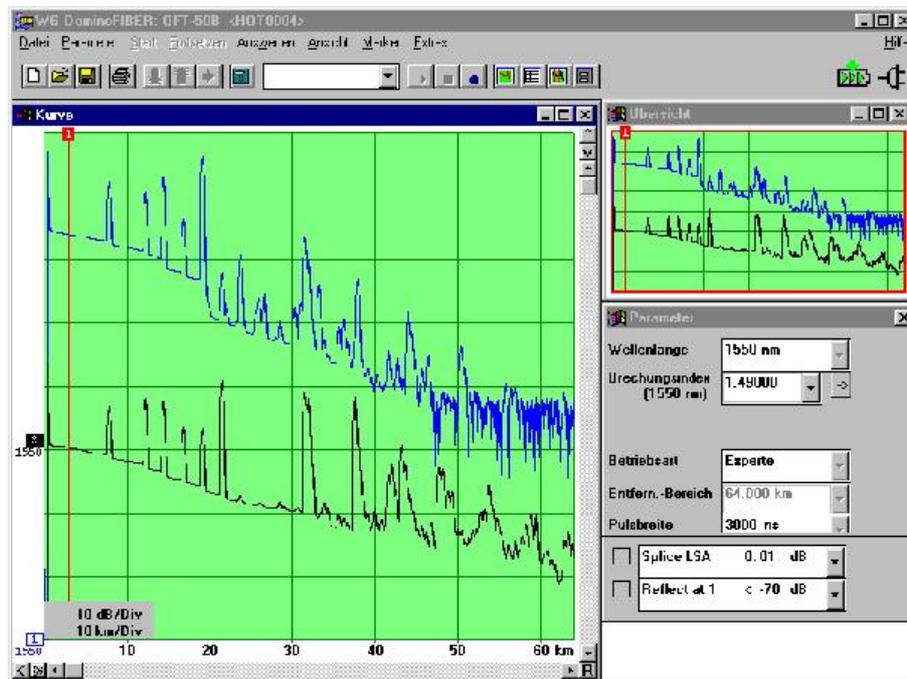


ABBILDUNG 4.4: Beispiel einer LWL-Rückstreuungsmessung

sondern bewirken sporadische Fehler oder Durchsatzminderungen. Durch die erzielten Erkenntnisse haben wir Erfahrungen für den täglichen Umgang mit dieser Technik gewonnen.

Ein weiterer Schwerpunkt der bisherigen Arbeiten lag auf der Erprobung von WDM (Wavelength Division Multiplexing) Geräten. Dabei handelt es sich um eine Technik, bei der auf einem Faserpaar von Lichtwellenleitern mehrere Datenverbindungen auf jeweils einer eigenen Frequenz (Farbe) gleichzeitig übertragen werden, wodurch ohne Verlegen neuer Lichtwellenleiter Kapazitätsgewinne werden können.

4.6.4 Gigabit-Testbed Projekt „Meta“ (Metacomputing durch Kopplung von Hochleistungsrechnern)

Bearbeitet von: Detlef Reichardt, Thomas Steinke

Im Teilprojekt Meta des Gigabit-Testbeds (GTB) wird durch Kopplung von Supercomputern des ZIB, RZG (Garching) und LRZ (München) am Beispiel von vier Anwendungsprogrammen aus den Gebieten Astrophysik, Materialforschung, Chemie und Polymerphysik eine Studie durchgeführt, in der verschiedene Aspekte des Metacomputings untersucht werden. Gemeinsamer Ausgangspunkt ist die im Rahmen dieses Teilprojekts vom Rechenzentrum der Universität Stuttgart weiter-

entwickelte Kommunikationsbibliothek PACX⁶ (**PA**rallel **C**omputer **EX**tension), die als transparente MPI-Schnittstelle die Kommunikation zwischen den im GTB gekoppelten Höchstleistungsrechnern übernimmt.

Am ZIB wird das Quantenchemie-Paket GAMESS-UK⁷ (**G**eneral **A**tomic and **M**olecular **E**lectronic **S**tructure **S**ystem, Daresbury Laboratories, UK) in mehreren Stufen auf eine Metacomputing-Umgebung, die zunächst aus den beiden Cray T3E Rechnern im ZIB und im RZG sowie deren Anbindung an das Gigabit-Testbed besteht, portiert. Das Ziel besteht darin, verteilte quantenchemische Berechnungen von großen Molekülen (wie z.B. von RNA-Fragmenten) auf dem Niveau der Hartree-Fock- oder der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zu ermöglichen und durch Nutzung der Kapazitäten mehrerer Supercomputer die Komplexität der behandelbaren Modelle vergrößern zu können bzw. turn-around-Zeiten zu verkürzen.

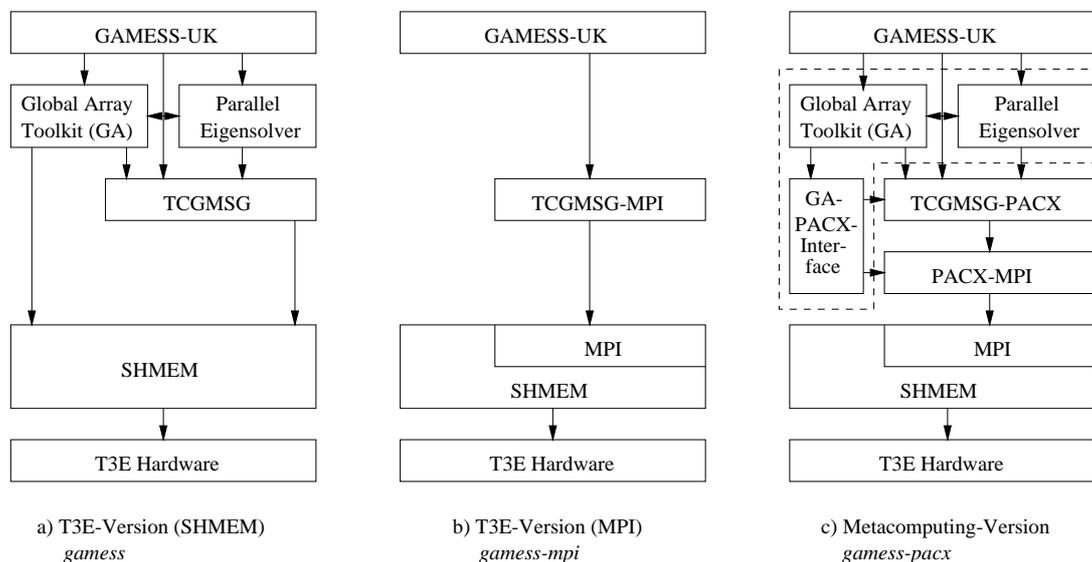


ABBILDUNG 4.5: Schichtenmodell der in GAMESS-UK eingesetzten numerischen und Kommunikationsbibliotheken

Zur Implementierung der Metacomputing-Fähigkeit ist eine Analyse der eingesetzten Kommunikationsbibliotheken und des Skalierungsverhaltens erforderlich (vgl. Abbildung 4.5 a). GAMESS-UK verwendet hinsichtlich der Parallelisierung die portable Message-Passing Bibliothek TCGMSG⁸. Sie bildet die Basis für das Global Array Toolkit⁹ (GA), das auf heterogenen Plattformen ein Nonuniform

⁶<http://www.hlrs.de/structure/organisation/par/projects/pacx-mpi/>

⁷<http://www.dl.ac.uk/CFS/>

⁸<http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/parsoft/tcgmsg/tcgmsg.html>

⁹<http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/global/ga.html>

Memory Access (NUMA) Programmiermodell implementiert und in diesem Sinne über reines Message-Passing hinausgeht, und einen parallelen Eigenwertlöser (PeIGS¹⁰).

Als Basis der bisher durchgeführten Implementierungsarbeiten diente eine bereits vorhandenen MPI-Schnittstelle (TCGMSG-MPI). Die damit erstellte MPI-Version von GAMESS-UK (vgl. Abbildung 4.5 b) zeigt für mittlere Systemgrößen (ca. 400 Basisfunktionen) und mittlere Knotenzahl (bis ca. 100) bei DFT-Rechnungen ein gutes Skalierungsverhalten. Zur Entwicklung einer PACX-Version (zunächst ohne GA und parallelen Eigenwertlöser) war die Implementierung verteilter globaler Taskzähler erforderlich, die eine dynamische Lastbalancierung in der Metacomputing-Umgebung ermöglichen.

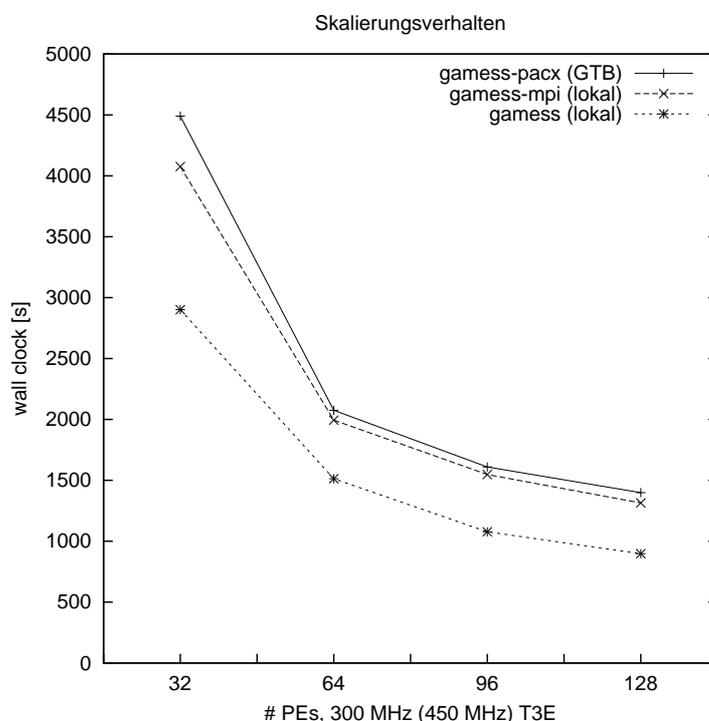


ABBILDUNG 4.6: Abhängigkeit der Gesamtrechenzeit von der Anzahl der PEs für eine Energie- und Kraftberechnung (DFT) von Morphin

DFT-Rechnungen von Morphin (410 Basisfunktionen – vgl. Abbildung 4.6) für 32 bis 128 PEs auf der Garching T3E (300 MHz) zeigen im Vergleich zu verteilten Rechnungen zwischen Garching und Berlin (16+16 bis 64+64 computing PEs) einen Leistungsabfall der PACX-Version bezüglich der MPI-Version von nur 8%. Bei einer derartigen Rechnung werden typischerweise 300 MB an Daten über das

¹⁰<http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/global/peigs.html>

Netz übertragen, wobei fast ausschließlich Broadcast-Operationen und globale Summen verwendet werden. Als weitere Gründe für den geringen Leistungsabfall lassen sich die verteilte Lastbalancierung und ein sparsamer Einsatz globaler Barrieren anführen.

An der Anpassung der GA an eine Metacomputing-Umgebung unter Verwendung von PACX wird gegenwärtig gearbeitet (siehe Abbildung 4.5 c), gestrichelter Bereich). Dazu wurde die TCGMSG-PACX-Schnittstelle um lokale Kommunikatoren erweitert, da hier eine transparente Verwendung von PACX nicht mehr möglich ist. Durch redundante Implementierung der Global Arrays auf den jeweils lokalen Partionen des „Metacomputers“ und Spiegelung der Daten soll der notwendige Datentransfer reduziert werden, wobei ein gewisser Mehraufwand, z.B. für die redundante Diagonalisierung auf den lokalen Partitionen bei den angestrebten Problemgrößen von 1000-2000 Basisfunktionen, als akzeptabel angesehen wird.

4.6.5 UNICORE

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: FZJ Jülich (Koordinator), DWD Offenbach, ECMWF Reading, LRZ München, PC² Paderborn, RUKA Karlsruhe, RUS Stuttgart, Genias Software GmbH, Pallas GmbH, debis Systemhaus, INPRO GmbH, FECIT, Hewlett-Packard, Hitachi, IBM, NEC, SGI, Siemens, Sun

Förderung: BMBF

UNICORE ist ein vom BMBF gefördertes Verbundprojekt mit dem Ziel, eine Software-Infrastruktur zu entwickeln, die Anwendern einen intuitiven, konsistenten und sicheren Zugang zu verteilten Supercomputer-Ressourcen ermöglicht. *UNICORE* realisiert die architektur- und betriebssystemunabhängige Erstellung von Batch-Jobs über ein grafisches Interface, die plattformunabhängige Kontrolle verteilter Jobs und sichere Kommunikation und Authentifizierung. In *UNICORE* werden moderne Web-Techniken, wie z. B. https, signed applets und Zertifikate für sichere Kommunikation und Authentifizierung eingesetzt. Allgemeine Informationen über das Projekt und eine Liste der Projektpartner sind auf der Web-Seite des Projekts¹¹ zu finden. Im Berichtszeitraum wurde eine prototypische Test-Umgebung für *UNICORE* entwickelt. Mit dieser Test-Umgebung wird eine Skriptsprache zur Verfügung gestellt, die die Funktionalität von *UNICORE* abbildet und in der Test-Jobs formuliert werden können. In der Sprache wurden eine Reihe von Test-Jobs formuliert. Die Test-Umgebung wertet Tests automatisch aus. Eine grafische Benutzerschnittstelle gestattet, durchzuführende Tests auszuwählen, zu starten, die Ergebnisse (Erfolg/Fehler) anzusehen und Details der automatisierten Diagnose zu studieren.

¹¹<http://www.fz-juelich.de/zam/RD/coop/unicore>

4.7 Zusammenarbeit mit auswärtigen Rechenzentren

4.7.1 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 15 Jahren bewirkt, daß zu jeder Zeit an mindestens einem der drei Standorte Berlin, Hannover oder 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.

Der von der Universität Kiel im NVV bereitgestellte Vektorrechner Cray J932 wurde im August 1999 zu einer SGI SV1 20 (mit 20 Prozessoren) umgerüstet, die Cray T94-4 (4 Prozessoren) wird unverändert angeboten. Darüber hinaus hat die Universität Kiel für ihre Benutzerschaft einen zur Cray T3E im ZIB kompatiblen Entwicklungsrechner Cray T3E mit 20 Prozessoren beschafft.

Das Regionale Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) hat seinen Entwicklungsrechner Cray T3E um weitere 20 auf nunmehr 40 Anwendungsprozessoren erweitert. Das Konzept, daß Benutzer vor Ort zum zentralen T3E-System compatible Entwicklungsrechner nutzen können, wurde damit weiter ausgebaut und hat sich sehr gut bewährt.

Im Rahmen des NVV stehen den Berliner Projekten neben den Berliner Hochleistungsrechnern die in Tabelle 4.7 angegebenen Kapazitäten zur Verfügung.

<i>Ort</i>	<i>Rechner</i>	<i>Prozessorzahl</i>	<i>Peak Performance je Prozessor</i>	<i>Berliner Anteil</i>
RRZN Hannover	Fujitsu/SNI VPP 300	4	2253 Mflop/s	11.250 ZVL
Universität Kiel	CRAY T94	4	1800 Mflop/s	23.000 ZVL
	SGI SV1	20	1200 Mflop/s	20.000 ZVL
ZIB Berlin	CRAY J90	16	200 Mflop/s	70.000 ZVL
	CRAY T3E	256 - 384	900/1200 Mflop/s	77.500 ZPL

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

4.7.2 Höchstleistungsrechenzentrum Nord (HLRN)

Auf der Basis der positiven Erfahrungen im Norddeutschen Vektorrechner-Verband und der Empfehlungen des Wissenschaftsrates aus dem Jahre 1995 zum Wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen haben die sechs norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein die gemeinsame Beschaffung eines Computersystems der höchsten Leistungsklasse beim Wissenschaftsrat angemeldet. In dem dazugehörigen Verwaltungsabkommen der Landesregierungen werden Fragen der Finanzierung, des Betriebs und der Nutzung eines solchen Systems sowie der Forschungsförderung und Nutzung des in der erweiterten Region vorhandenen Know-Hows („Kompetenznetzwerk“) geregelt.

Der dringende Bedarf nach einem derartigen System, welches sich in der Leistung an den derzeit in den USA im Rahmen der *Accelerated Strategic Computing Initiative* (ASCI) installierten Systeme orientiert, ist in vorangegangenen Benutzerbefragungen in den sechs Ländern sowie in länderübergreifenden Workshops aufgezeigt worden (siehe z.B. Workshop *Power User and Supercomputer*, 19.–20. Mai 1999 am ZIB).

Im Dezember 1999 hat sich die vom Wissenschaftsrat eingesetzte Arbeitsgruppe „Hochleistungsrechner“ erneut mit dem Antrag befaßt. In ihrem Votum hat die Arbeitsgruppe den dringenden regionalen Bedarf anerkannt und die Beschaffung eines massiv parallelen Systems mit den Standorten Berlin (ZIB) und Hannover (RRZN) befürwortet. Mit diesem virtuellen System, das zwar geographisch verteilt betrieben, aus Benutzer- und Systemadministrator-Sicht aber als ein homogenes System gehandhabt werden soll, wird ein erster Schritt in das zukunfts-trächtige Gebiet des Metacomputing eröffnet.

4.7.3 Zusammenarbeit mit anderen Hochleistungsrechenzentren

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 (Hochleistungsrechenzentrum 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 4.6.5) 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, Parallelrechner Cray T3E-1200 mit 512 Prozessoren).

ren und Parallel-Vektor-Prozessorsystem Cray T90 mit 12 Prozessoren; HLRS: Vektorrechner NEC SX-4/40 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 1999 wurden die Rechner des HLRS (Stuttgart) und die des NIC (Jülich) von einigen Berliner Projekten in Anspruch genommen, da die lokale vom ZIB angebotene Rechenleistung nicht ausreichend war.

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 99-01. Thomas Wolf. *A comparison of four approaches to the calculation of conservation laws.*

Abstract: The paper compares computational aspects of four approaches to compute conservation laws of single differential equations or systems of them, ODEs and PDEs. The only restriction, required by two of the four corresponding computer algebra programs, is that each DE has to be solvable for a leading derivative. Extra constraints may be given. Examples of new conservation laws include non-polynomial expressions, an explicit variable dependence and conservation laws involving arbitrary functions. Examples involve the following equations: Ito, Liouville, Burgers, Kadomtsev-Petviashvili, Karney-Sen-Chu-Verheest, Boussinesq, Tzetzica, Benney.

SC 99-02. Vladimir V. Sokolov; Thomas Wolf. *A symmetry test for quasilinear coupled systems.*

Abstract: It is well known that the following class of systems of evolution equations

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + F(u, v, u_x, v_x), \\ v_t = -v_{xx} + G(u, v, u_x, v_x), \end{cases} \quad (5.1)$$

is very rich in integrable cases. The complete classification problem is very difficult. Here we consider only the most interesting (from our opinion) subclass of systems (1). Namely, we consider equations linear in all derivatives

of the form

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + A_1(u, v)u_x + A_2(u, v)v_x + A_0(u, v) \\ v_t = -v_{xx} + B_1(u, v)v_x + B_2(u, v)u_x + B_0(u, v). \end{cases} \quad (5.2)$$

without any restrictions on the functions $A_i(u, v)$, $B_i(u, v)$.

SC 99-03. Alexander Martin. *Integer Programs with Block Structure*.

Abstract: In this thesis we study and solve integer programs with block structure, i. e., problems that after the removal of certain rows (or columns) of the constraint matrix decompose into independent subproblems. The matrices associated with each subproblem are called blocks and the rows (columns) to be removed linking constraints (columns). Integer programs with block structure come up in a natural way in many real-world applications. The methods that are widely used to tackle integer programs with block structure are decomposition methods. The idea is to decouple the linking constraints (variables) from the problem and treat them at a superordinate level, often called master problem. The resulting residual subordinate problem then decomposes into independent subproblems that often can be solved more efficiently. Decomposition methods now work alternately on the master and subordinate problem and iteratively exchange information to solve the original problem to optimality.

In Part I we follow a different approach. We treat the integer programming problem as a whole and keep the linking constraints in the formulation. We consider the associated polyhedra and investigate the polyhedral consequences of the involved linking constraints. The variety and complexity of the new inequalities that come into play is illustrated on three different types of real-world problems. The applications arise in the design of electronic circuits, in telecommunication and production planning. We develop a branch-and-cut algorithm for each of these problems, and our computational results show the benefits and limits of the polyhedral approach to solve these real-world models with block structure.

Part II of the thesis deals with general mixed integer programming problems, that is integer programs with no apparent structure in the constraint matrix. We will discuss in Chapter 5 the main ingredients of an LP based branch-and-bound algorithm for the solution of general integer programs. Chapter 6 then asks the question whether general integer programs decompose into certain block structures and investigate whether it is possible to recognize such a structure. The remaining two chapters exploit information about the block structure of an integer program. In Chapter 7 we parallelize parts of the dual simplex algorithm, the method that is commonly used for the solution of the underlying linear programs within a branch-and-cut algorithm. In Chapter 8 we try to detect small blocks in the constraint matrix and to derive new cutting planes that strengthen the integer programming

formulation. These inequalities may be associated with the intersection of several knapsack problems. We will see that they significantly improve the quality of the general integer programming solver introduced in Chapter 5.

Keywords: integer programming, cutting planes, block structure

SC 99-04. Frank Seewald; Anja Pollei; Matthias Kraume; Walter Mittelbach; Jens Lang. *Numerical Calculation of the Heat Transfer in an Adsorption Energy Storage with KARDOS.*

Abstract: A new seasonal energy storage for thermal solar systems has been developed on the basis of an adsorption-desorption process. Design and optimization of this storage will be supported by numerical simulations of heat and mass transfer with KARDOS. This paper focuses on the unsteady heat transfer during the major operating step of energetic discharge of the storage, which is characterized by conductive heat transfer in the fixed bed and a strong heat source caused by the adsorption enthalpy. Results are interpreted concerning the influence of variations in the parameter set. The method of implementation of the differential equation will be shown as well as the post-processing and gridwriting programs.

SC 99-05. Stefan Lohrum; Wolfram Schneider; Josef Willenborg. *De-duplication in KOBV.*

Abstract: In KOBV we offer the user an efficient tool for searching regional and worldwide accessible library catalogues (KOBV search engine). Search is performed by a distributed Z39.50 retrieval and an index based quicksearch. Due to the number of catalogues, result sets may contain a significant amount of duplicate records.

Therefore we integrate a de-duplication procedure into KOBV search engine. It is part of the distributed search and the KOBV quicksearch as well. Main goals are the presentation of uniform retrieval results, the preservation of retrieval quality and cutting off redundant information. At least we keep an eye on efficiency. De-duplication is fully parametrizable, so that settings can be changed easily on line.

SC 99-06. Dietrich Hauptmeier; Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Hans-Christoph Wirth. *Euler is Standing in Line.*

Abstract: In this paper we study algorithms for “Dial-a-Ride” transportation problems. In the basic version of the problem we are given transportation jobs between the vertices of a graph and the goal is to find a shortest transportation that serves all the jobs. This problem is known to be NP-hard even on trees. We consider the extension when precedence relations between the jobs with the same source are given. Our results include a polynomial time algorithm on paths and an approximation algorithm on general graphs with a performance of $9/4$. For trees we improve the performance to $5/3$.

SC 99-07. Dietrich Braess; Peter Deuffhard; Konstantin Lipnikov. *A Subspace Cascadic Multigrid Method for Mortar Elements.*

Abstract: A cascadic multigrid (CMG) method for elliptic problems with strong material jumps is proposed and analyzed. Non-matching grids at interfaces between subdomains are allowed and treated by mortar elements. The arising saddle point problems are solved by a subspace confined conjugate gradient method as smoother for the CMG. Details of algorithmic realization including adaptivity are elaborated. Numerical results illustrate the efficiency of this CMG algorithm.

SC 99-08. Dietrich Hauptmeier; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *The Online Dial-a-Ride Problem under Reasonable Load.*

Abstract: In this paper, we analyze algorithms for the online dial-a-ride problem with request sets that fulfill a certain worst-case restriction: roughly speaking, a set of requests for the online dial-a-ride problem is reasonable if the requests that come up in a sufficiently large time period can be served in a time period of at most the same length. This new notion is a stability criterion implying that the system is not overloaded.

The new concept is used to analyze the online dial-a-ride problem for the minimization of the maximal resp. average flow time. Under reasonable load it is possible to distinguish the performance of two particular algorithms for this problem, which seems to be impossible by means of classical competitive analysis.

Keywords: online optimization, competitive analysis, elevator

SC 99-09. Martin Grötschel; Dietrich Hauptmeier; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Simulation Studies for the Online-Dial-a-Ride Problem.*

Abstract: In a large distribution center of Herlitz AG, Berlin, we investigated the elevator subsystem of the fully automated pallet transportation system. Each elevator may carry one pallet and has to serve eight levels. The goal is to minimize the average resp. the maximum flow time. The variants of this elevator control problem have been subject of recent theoretical research and are known as online-dial-a-ride problems. In this paper we investigate several online algorithms for several versions of online-dial-a-ride problems by means of a simulation program, developed on the basis of the simulation library AMSEL. We draw statistics from samples of randomly generated data providing for different load situations. Moreover, we provide preliminary studies with real production data for a system of five elevators connected by a conveyor circuit, as can be found at the Herlitz plant. We show which algorithms are best under certain load situations and which lead to break downs under particular circumstances.

SC 99-10. Christof Schütte. *Partial Wigner Transforms and the Quantum-Classical Liouville Equation.*

Abstract: In molecular dynamics applications there is a growing interest in

mixed quantum-classical models. The *quantum-classical Liouville equation* (QCL) describes most atoms of the molecular system under consideration by means of classical phase space density but an important, small portion of the system by means of quantum mechanics. The QCL is derived from the full quantum dynamical (QD) description by applying the Wigner transform to the “classical part” of the system only. We discuss the conditions under which the QCL model approximates the full QD evolution of the system. First, analysis of the asymptotic properties of the Wigner transform shows that solving the QCL yields a first order approximation of full quantum dynamics. Second, we discuss the adiabatic limit of the QCL. This discussion shows that the QCL solutions may be interpreted as classical phase space densities, at least near the adiabatic limit. Third, it is demonstrated that the QCL yields good approximations of *non-adiabatic quantum effects*, especially near so-called *avoided crossings* where most quantum-classical models fail.

SC 99-11. Burkhard Schmidt; Petra Žďánská. *Solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation for Highly Symmetric Potentials.*

Abstract: The method of symmetry adapted wavepackets (SAWP) to solve the time-dependent Schrödinger equation for a highly symmetric potential energy surface is introduced. The angular dependence of a quantum-mechanical wavepackets is expanded in spherical harmonics where the number of close-coupled equations for the corresponding radial functions can be efficiently reduced by symmetry adaption of the rotational basis using the SWAP approach. Various techniques to generate symmetry adapted spherical harmonics (SASHs) for the point groups of highest symmetry (octahedral, icosahedral) are discussed. The standard projection operator technique involves the use of Wigner rotation matrices. Two methods to circumvent numerical instabilities occurring for large azimuthal quantum numbers are suggested. The first is based on a numerical scheme which employs Gaussian integrations yielding exact and stable results. The second is a recursive algorithm to generate higher order SASHs accurately and efficiently from lower order ones. The paper gives a complete set of “seed functions” generated by projection techniques which can be used obtain SASHs for all irreducible representations of the octahedral and icosahedral point groups recursively.

SC 99-12. Peter Backhaus; Burkhard Schmidt; Marcos Dantus. *Control of photoassociation yield: A quantum-dynamical study of the mercury system to explore the role of pulse duration from nanoseconds to femtoseconds.*

Appeared in: Chemical Physics Letters 306 (1999) pp.18-24

Abstract: The photoassociation process shows strong dependence on the temporal duration of the electromagnetic field pulses and their frequencies. This dependence is investigated using quantum mechanical simulations that

include all ranges of impact parameters and contributions from bound-to-bound transitions. The photoassociation yield of mercury atoms to produce excimer dimers is enhanced for short (ps) and for ultrashort (fs) pulse durations. Ultrashort laser pulses effectively overlap the entire range of free-to-bound transition, therefore achieving a maximum probability. Short pulses show a maximum in the photoassociation yield when their carrier frequency overlaps a particular free-to-bound spectroscopic resonance. Implications of these calculations on efforts to control bimolecular reactions are discussed.

- SC 99-13.** Beate Rusch. *Normierungen von Zeichenfolgen als erster Schritt des Match - Zur Dublettbehandlung im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg -*.

Abstract: Im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wird die verteilte Suche in heterogenen Datenbank mit einer integrierten Dublettenerkennung und -zusammenführung realisiert. Beschrieben werden die einzelnen attributspezifischen Normierungsschritte, die dem eigentlichen Vergleich (MATCH) zweier Datensätze vorangehen.

- SC 99-14.** Monika Kuberek (Red.). *Gemeinsamer KOBV-Standard.*

Abstract: Der neue "verteilte" Bibliotheksverbund KOBV erfordert neue Arbeitsweisen und neue Formen der Zusammenarbeit der Bibliotheken untereinander. Im KOBV wird es keine zentrale Erschließung geben, sondern die Erschließung wird lokal, in den Bibliotheken durchgeführt. Entsprechend ihren Nutzerbedürfnissen bestimmen die Bibliotheken die Erschließungsart, den Erschließungsumfang und die Erschließungstiefe selbst. Als gemeinsamer regionaler Standard wird lediglich ein "Mindeststandard" auf der Basis von RAK-WB definiert. Dieser Gemeinsame KOBV-Standard berücksichtigt vor allem suchrelevante Elemente, um den Nutzern im KOBV möglichst einheitliche Sucheinstiege zu bieten. Der Gemeinsame KOBV-Standard wird in diesem Papier vorgestellt.

- SC 99-15.** Monika Kuberek. *Umgang mit hierarchischen Strukturen des MAB2-Datenformates in der KOBV-Suchmaschine.*

Abstract: Die KOBV-Suchmaschine verarbeitet Daten im bibliographischen Datenformat MAB2 (Maschinelles Austauschformat für Bibliotheken, Ausgabe 2), das in deutschsprachigen Ländern angewandt wird. Im MAB2-Format sind für mehrbändige begrenzte Werke und fortlaufende Sammelwerke hierarchische Strukturen realisiert - mit bis zu drei Hierarchiestufen und unterschiedlichem Aufbau, je nachdem, ob es sich um ein begrenztes Werk oder um ein Werk ohne geplanten Abschluß handelt. Jede hierarchische Stufe entspricht einem Datensatz, die zusammengehörigen Datensätze sind miteinander verknüpft. Inhaltlich enthält eine Stufe oft nur Teilinformationen des Werkes; erst die Stufen zusammen ergeben die vollständige Information.

In der KOBV-Suchmaschine werden Dokumente aus verschiedenen Bibliotheken zusammengeführt. Hierarchische Strukturen potenzieren gewissermaßen die mit der Dublettenbehandlung (Match- und Merge-Verfahren) verbundene Problematik: Es müssen nicht nur Datensätze aus verschiedenen Bibliotheken zusammengeführt werden, sondern darüber hinaus die zusammengehörigen Datensätze der unterschiedlichen Hierarchiestufen.

Der Artikel enthält eine ausführliche Analyse der in MAB2 vorkommenden hierarchischen Strukturen, beschreibt die Anforderungen für die Lieferung hierarchischer Datensätze aus den lokalen Systemen und stellt das Verfahren vor, wie in der KOBV-Suchmaschine mit diesen hierarchischen Datenstrukturen bei der Dublettenbehandlung umgegangen wird. Anhand von Fallbeispielen wird die Problematik der Verknüpfung zusammengeführter Datensätze erörtert.

SC 99-16. Monika Kuberek. *Dublettenbehandlung (Match- und Merge-Verfahren) in der KOBV-Suchmaschine - Grundlagen -*.

Zusammenfassung: Die Recherche über die KOBV-Suchmaschine liefert Datensätze aus unterschiedlichen Bibliotheken. Damit der Nutzer nicht viele, unter Umständen lange Listen für jede Bibliothek durchblättern muss werden die Datensätze in der KOBV-Suchmaschine einer Dublettenbehandlung (Match- und Merge-Verfahren) unterzogen. Ziel dieses Verfahrens ist es, dem Nutzer möglichst nur einen einzigen Datensatz mit allen zugehörigen Bestandsnachweisen aus den Bibliotheken anzuzeigen. In dem vorliegenden Papier steht das Match-Verfahren, das von der KOBV-Projektgruppe eigens für den Einsatz in der KOBV-Suchmaschine entwickelt wurde, im Vordergrund. Das Merge-Verfahren, das auf Konzepte von Ex Libris zurückgeht, ist lediglich am Rande erwähnt. Ziel bei der Entwicklung des Match- und Merge-Verfahrens war es, in der KOBV-Suchmaschine ein Verfahren zu implementieren, das vollkommen automatisiert, ohne Zuhilfenahme manueller und intellektueller Eingriffe, abläuft. In diesem Papier sind die Grundlagen zum Match- und Merge-Verfahren in der KOBV-Suchmaschine zusammengefasst. Zunächst wird definiert, was unter einer Dublette überhaupt zu verstehen ist. Die Begriffe Dokument und Werk werden analysiert, die wesentlich sind für die Entscheidung, welche Datensätze in der KOBV-Suchmaschine letztendlich zusammengeführt werden. Anhand umfassender Literaturrecherchen werden die zur Dublettenbehandlung herangezogenen bibliographischen Beschreibungselemente (Attribute) in verschiedenen MARC- und MAB-Datenbanken ermittelt und grundsätzliche Probleme beim Erkennen dubletter bibliographischer Datensätze aufgezeigt. Schließlich werden Verfahren vorgestellt und diskutiert, wie die Attribute in das Match- und Merge-Verfahren eingebunden werden: bei nur einer Gewichtung (positiver Wert) und bei zwei Gewichtungen (positiver und negativer Wert). Auf dieser Basis werden Tabellen mit Werten für zwei unter-

schiedliche Gewichtungsverfahren in der KOBV-Suchmaschine entwickelt, die als Ausgangswerte für erste Testverfahren in den Match- und Merge-Algorithmus in der KOBV-Suchmaschine implementiert werden.

SC 99-17. Martin Groetschel. *My Favorite Theorem: Characterizations of Perfect Graphs.*

Abstract: This paper summarizes and discusses various characterizations of perfect graphs and mentions some open problems in this area.

SC 99-18. Christof Schuette. *Conformational Dynamics: Modelling, Theory, Algorithm, and Application to Biomolecules.*

Abstract: The function of many important biomolecules comes from their dynamic properties and their ability to switch between different *conformations*. In a conformation, the large scale geometric structure of the molecule is understood to be conserved, whereas on smaller scales the system may well rotate, oscillate or fluctuate. In a recent article [J. Comp. Phys., 151,1 (1999)], the present author and coworkers demonstrated that (a) conformations can be understood as almost invariant sets of some Markov chain being defined via the Hamiltonian system governing the molecular dynamics and that (b) these sets can efficiently be computed via eigenvectors of the corresponding Markov operator. The present manuscript reviews the mathematical modelling steps behind the novel concept, includes a rigorous analytical justification of this approach and especially of the numerical details of the algorithm, and illustrates its performance when applied to realistic molecular systems.

SC 99-19. Peter Deuffhard; Rupert Klein; Alexander Reinefeld; Hinnerk Stüben (Hrsg.). *Power-User und Supercomputer.*

Abstract: Abstract-Sammlung zum gleichnamigen Workshop am ZIB vom 19.–20. Mai 1999

SC 99-20. Jens Lang. *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems. Theory, Algorithm, and Applications.*

Abstract: This monograph has been written to illustrate the interlocking of theory, algorithm, and application in developing solution techniques for complex PDE systems. A deep theoretical understanding is necessary to produce a powerful idea leading to a successful algorithm. Efficient and robust implementation is the key to make the algorithm perform satisfactorily. The extra insight obtained by solving real-life problems brings out the structure of the method more clearly and suggests often ways to improve the numerical algorithm.

SC 99-21. Wolfram Schneider. *Ein verteiltes Bibliotheks-Informationssystem auf Basis des Z39.50 Protokolls.*

Zusammenfassung: Diese Diplomarbeit beschreibt ein verteiltes Bibliotheks-Informationssystem für bibliographische Datenbanken im In-

ternet. Der Name des Systems ist ZACK.

Der Benutzer kann mit ZACK in einer oder mehreren bibliographischen Datenbanken nach einem Dokument suchen und die Treffer in die eigene lokale Datenbank übernehmen. Mit der Übernahme der Datensätze aus einer fremden Datenbank wird die Erfassung neuer Dokumente wesentlich erleichtert, da die Eigenkatalogisierung auf ein Minimum beschränkt werden kann. Es wird doppelte Arbeit vermieden, und die Datensätze haben eine gleichbleibend hohe Qualität.

Bei der verteilten Suche mit ZACK wird parallel in mehreren Datenbanken gesucht. Dubletten werden als solche erkannt. Dem Benutzer wird eine übersichtliche Kurztrefnerliste ohne doppelte Einträge angeboten. Er kann dann selbst entscheiden, aus welcher Datenbank er die Datensätze übernimmt. Die verteilte Suche hat in der Praxis eine deutlich bessere Trefferquote gebracht als die Suche in nur einer Datenbank. Dabei bleibt die Antwortzeit in einem für den Benutzer akzeptablen Rahmen. Die Kurztrefnerliste wird durch die Dublettenkontrolle kürzer und übersichtlicher.

English Title: A Distributed Library Information System on the Basis of the Z39.50 Protocol

Abstract: This diploma thesis describes a distributed library information system for bibliographic databases in the Internet. The name of the system is ZACK.

With ZACK the user is able to search for a particular document in several databases and to include the matches in his/her own local database. The inclusion of data records from an external database makes the capture of new documents much easier, as internal cataloging is reduced to a minimum. Double work is eliminated and a continuously high quality of data record is ensured.

The distributed search by means of ZACK is carried out in several databases in parallel. Duplicates are recognized; and a short list of matches without double entries is offered. The user can then decide for himself from which database to include data records. In practice, a distributed search has produced far better results than the search in one particular database. Response times are within an acceptable limit for the user. The short list of hits is made clearer and more concise by the duplicate check.

The diploma thesis is also available in PDF, HTML, and ASCII format: <http://wolfram.schneider.org/lv/diplom/> .

SC 99-22. Rudolf Beck. *Graph-Based Algebraic Multigrid for Lagrange-Type Finite Elements on Simplicial Meshes.*

Abstract: We present an algebraic multigrid preconditioner which uses only the graphs of system matrices. Some elementary coarsening rules are stated, from which an advancing front algorithm for the selection of coarse grid nodes is derived. This technique can be applied to linear Lagrange-type

finite element discretizations; for higher-order elements an extension of the multigrid algorithm is provided. Both two- and three-dimensional second order elliptic problems can be handled. Numerical experiments show that the resulting convergence acceleration is comparable to classical geometric multigrid.

SC 99-23. Michael Meyer. *Ab Initio Study of Flavonoids*.

(Appeared in: Int. J. Quantum. Chem. 76, 724-732 [2000])

Abstract: Flavone and the flavylum ion have been studied at Hartree-Fock, Møller-Plesset and B3LYP hybrid density functional level to determine the structures and barriers to internal rotation. Both molecules have a high perpendicular barrier about the single bond connecting the phenyl ring with the benzopyrone and benzopyrylium ring, respectively. In contrast to biphenyl both molecules have low coplanar barriers. B3LYP overestimates the perpendicular barrier heights compared to other methods. The dependence of the population and orbital energies on the torsion has been investigated and the structures of both flavonoids have been estimated by means of a reaction field model.

SC 99-24. Martin Grötschel; Wolfgang Dalitz (Hrsg.). *Math-Net Abschlussbericht*.

Abstract: Das Math-Net ist ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik. Es basiert auf den lokalen Informationsangeboten der Fachbereiche, die im Math-Net integriert, nutzerfreundlich aufbereitet und zugänglich gemacht werden sollen. Das Math-Net ist durch die freiwillige Mitarbeit weiterer Institutionen in Deutschland zu einem flächendeckenden Dienst ausgebaut worden. Die am Projekt beteiligten Institutionen haben die mathematischen Institutionen in ihrer Region beim Aufbau eines qualitativ hochwertigen lokalen Informationsangebotes unterstützt und die Integration der lokalen Informationsangebote in das Math-Net koordiniert.

SC 99-25. Christof Schütte; Wilhelm Huisinga. *On Conformational Dynamics induced by Langevin Processes*.

Abstract: The function of many important biomolecules is related to their dynamic properties and their ability to switch between different *conformations*, which are understood as *almost invariant* or *metastable* subsets of the positional state space of the system. Recently, the present authors and their coworkers presented a novel algorithmic scheme for the direct numerical determination of such metastable subsets and the transition probability between them. Although being different in most aspects, this method exploits the same basic idea as DELLNITZ and JUNGE in their approach to almost invariance in discrete dynamical systems: the almost invariant sets are computed via certain eigenvectors of the Markov operators associated with the dynamical behavior.

SC 99-26. Karin Gatermann. *Computer Algebra Methods for Equivariant Dynamical Systems.*

Abstract: An introductory chapter on Groebner bases is given which also includes new results on the detection of Groebner bases for sparse polynomial systems. Algorithms for the computation of invariants and equivariants for finite groups, compact Lie groups and algebraic groups are presented and efficient implementation and time comparison are discussed. This chapter also includes improvements of the computation of Noether normalisation and Stanley decomposition. These results are applied in symmetric bifurcation theory and equivariant dynamics. As preparation of the investigation of the orbit space reduction three methods are compared for solving symmetric polynomial systems exactly. The method of orbit space reduction is improved by using the Cohen-Macaulayness of the invariant ring and nested Noether normalization. Finally this is applied for a case of mode interaction in the Taylor-Couette problem.

SC 99-27. Karin Gatermann; Birkett Huber. *A family of sparse polynomial systems arising in chemical reaction systems.*

Abstract: A class of sparse polynomial systems is investigated which is defined by a weighted directed graph and a weighted bipartite graph. They arise in the model of mass action kinetics for chemical reaction systems. In this application the number of real positive solutions within a certain affine subspace is of particular interest. We show that the simplest cases are equivalent to binomial systems while in general the solution structure is highly determined by the properties of the two graphs. First we recall results by Feinberg and give rigorous proofs. Secondly, we explain how the graphs determine the Newton polytopes of the system of sparse polynomials and thus determine the solution structure. The results on positive solutions from real algebraic geometry are applied to this particular situation. Examples illustrate the theoretical results.

SC 99-28. Ernst-Michael Ilgenfritz; Werner Kerler; Hinnerk Stüben. *Decorrelation of the topological charge in tempered Hybrid Monte Carlo simulations of QCD.*

Abstract: We study the improvement of simulations of QCD with dynamical Wilson fermions by combining the Hybrid Monte Carlo algorithm with parallel tempering. As an indicator for decorrelation we use the topological charge.

SC 99-29. Martin Grötschel; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Wo bleibt der Aufzug?*

(Erschienen in: OR News Nr. 5, März 1999, ISSN 1437-2045, S. 11-13)

Abstract: Dieser Artikel gibt eine allgemeinverständliche Einführung in die spezielle Problematik kombinatorischer Online-Probleme am Beispiel der Fahrstuhlsteuerung.

SC 99-30. Marc C. Steinbach. *Markowitz Revisited: Single-Period and Multi-Period Mean-Variance Models.*

Abstract: Mean-variance portfolio analysis provided the first quantitative treatment of the tradeoff between profit and risk. We investigate in detail the interplay between objective and constraints in a number of single-period variants, including semi-variance models. Particular emphasis is laid on avoiding the penalization of overperformance. The results are then used as building blocks in the development and theoretical analysis of multi-period models based on scenario trees. A key property is the possibility to remove surplus money in future decisions, yielding approximate downside risk minimization.

SC 99-31. Norbert Ascheuer; Matteo Fischetti; Martin Grötschel. *Solving the Asymmetric Travelling Salesman Problem with Time Windows by Branch-and-Cut.*

Abstract: Many optimization problems have several equivalent mathematical models. It is often not apparent which of these models is most suitable for practical computation, in particular, when a certain application with a specific range of instance sizes is in focus. Our paper addresses the Asymmetric Travelling Salesman Problem with time windows (ATSP-TW) from such a point of view. The real-world application we aim at is the control of a stacker crane in a warehouse.

We have implemented codes based on three alternative integer programming formulations of the ATSP-TW and more than ten heuristics. Computational results for real-world instances with up to 233 nodes are reported, showing that a new model presented in a companion paper outperforms the other two models we considered — at least for our special application — and that the heuristics provide acceptable solutions.

SC 99-32. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Andreas Löbel. *Der Schnellste Weg zum Ziel.*

Abstract: Wir geben eine Einführung in die Mathematik von und mit Wegen. Nicht auf dem kürzesten, aber auf einem hoffentlich kurzweiligen Weg!

SC 99-33. Malte Zöckler; Detlev Stalling; Hans-Christian Hege. *Fast and Intuitive Generation of Geometric Shape Transitions.*

Abstract: We describe a novel method for continuously transforming two triangulated models of arbitrary topology into each other. Equal global topology for both objects is assumed, extensions for genus changes during metamorphosis are provided. The proposed method addresses the major challenge in 3D metamorphosis, namely specifying the morphing process intuitively, with minimal user interaction and sufficient detail. Corresponding regions and point features are interactively identified. These regions are parametrized automatically and consistently, providing a basis for smooth

interpolation. Utilizing suitable 3D interaction techniques a simple and intuitive control over the whole morphing process is offered.

SC 99-34. Peter Deuffhard. *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs.*

Abstract: This series of lectures has been given to a class of mathematics postdocs at a European summer school on *Computational Mathematics Driven by Industrial Applications* in Martina Franca, Italy (organized by CIME). It deals with a variety of challenging real life problems selected from clinical cancer therapy, communication technology, polymer production, and pharmaceutical drug design. All of these problems from rather diverse application areas share two common features: (a) they have been modelled by various *differential equations* – elliptic, parabolic, or Schrödinger–type partial differential equations, countable ordinary differential equations, or Hamiltonian systems, (b) their numerical solution has turned out to be real challenge to computational mathematics.

SC 99-35. Matthias Linke; Carsten Krebs; Marion Schünemann. *Metacomputing zwischen Berlin und Rostock.*

Zusammenfassung: Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und das Rechenzentrum der Universität Rostock, beide Einrichtungen betreiben massiv-parallele Rechner vom Typ CRAY T3E, haben sich an Hand einer Anwendung aus dem Bereich der Botanik mit den Möglichkeiten der Verteilung auf zwei Parallelrechner, gekoppelt nur über das Breitband-Wissenschaftsnetz des Deutschen Forschungsnetzes, vertraut gemacht.

Das Projekt besteht aus zwei Teilen. Im ersten Teil wird ausführlich das zwischen den Rechnern liegende Netz und die Ergebnisse einer Performanceanalyse dieses Netzes dokumentiert. Der zweite Teil beschreibt die Anwendung „Simulation des Wachstums von Pflanzen“ sowie die Ergebnisse der Verteilung dieser Anwendung auf beide Rechner.

SC 99-36. Christof Schütte; Wilhelm Huisinga; Peter Deuffhard. *Transfer Operator Approach to Conformational Dynamics in Biomolecular Systems.*

Abstract: The article surveys the development of novel mathematical concepts and algorithmic approaches based thereon in view of their possible applicability to biomolecular design.

Both a first deterministic approach, based on the Frobenius-Perron operator corresponding to the flow of the Hamiltonian dynamics, and later stochastic approaches, based on a spatial Markov operator or on Langevin dynamics, can be subsumed under the unified mathematical roof of the transfer operator approach to effective dynamics of molecular systems. The key idea of constructing specific transfer operators especially tailored for the purpose of conformational dynamics appears as the red line throughout the paper. Different steps of the algorithm are exemplified by a trinucleotide molecular

system as a small representative of possible RNA drug molecules.

- SC 99-37.** Christoph Helmberg; K.C. Kiwiel. *A Spectral Bundle Method with Bounds.*

Abstract: Semidefinite relaxations of quadratic 0-1 programming or graph partitioning problems are well known to be of high quality. However, solving them by primal-dual interior point methods can take much time even for problems of moderate size. The recent spectral bundle method of Helmberg and Rendl can solve quite efficiently large structured equality-constrained semidefinite programs if the trace of the primal matrix variable is fixed, as happens in many applications. We extend the method so that it can handle inequality constraints without seriously increasing computation time. Encouraging preliminary computational results are reported.

- SC 99-38.** Tobias Galliat; Wilhelm Huisinga; Peter Deuffhard. *Self-Organizing Maps Combined with Eigenmode Analysis for Automated Cluster Identification.*

Abstract: One of the important tasks in Data Mining is automated cluster analysis. Self-Organizing Maps (SOMs) introduced by KOHONEN are, in principle, a powerful tool for this task. Up to now, however, its cluster identification part is still open to personal bias. The present paper suggests a new approach towards automated cluster identification based on a combination of SOMs with an eigenmode analysis that has recently been developed by DEUFLHARD ET AL. in the context of molecular conformational dynamics. Details of the algorithm are worked out. Numerical examples from Data Mining and Molecular Dynamics are included.

- SC 99-39.** Johannes Schmidt-Ehrenberg; Hans-Christian Hege. *Visualizing Quantum Mechanical Phenomena.*

Abstract: In this paper we discuss several ways to visualize stationary and non-stationary quantum mechanical systems. We demonstrate an approach for the quantitative interpretation of probability density isovalues which yields a reasonable correlation between isosurfaces for different time-steps. As an intuitive quantity for visualizing the momentum of a quantum system we propose the probability flow density which can be treated by vector field visualization techniques. Finally, we discuss the visualization of non-stationary systems by a sequence of single timestep images.

- SC 99-40.** Rudolf Beck. *Algebraic Multigrid by Component Splitting for Edge Elements on Simplicial Triangulations.*

Abstract: Our focus is on Maxwell's equations in the low frequency range; two specific applications we aim at are time-stepping schemes for eddy current computations and the stationary double-curl equation for time-harmonic fields. We assume that the computational domain is discretized by triangles or tetrahedrons; for the finite element approximation we choose

Nédélec's $H(\text{curl})$ -conforming edge elements of the lowest order.

For the solution of the arising linear equation systems we devise an algebraic multigrid preconditioner based on a spatial component splitting of the field. Mesh coarsening takes place in an auxiliary subspace, which is constructed with the aid of a nodal vector basis. Within this subspace coarse grids are created by exploiting the matrix graphs. Additionally, we have to cope with the kernel of the curl -operator, which comprises a considerable part of the spectral modes on the grid. Fortunately, the kernel modes are accessible via a discrete Helmholtz decomposition of the fields; they are smoothed by additional algebraic multigrid cycles.

Numerical experiments are included in order to assess the efficacy of the proposed algorithms.

SC 99-41. Gary Powell; Martin Weiser. *Container Adaptors*.

Abstract: The C++ standard template library has many useful containers for data. The standard library includes two adaptors, queue, and stack. The authors have extended this model along the lines of relational database semantics. Sometimes the analogy is striking, and we will point it out occasionally. An adaptor allows the standard algorithms to be used on a subset or modification of the data without having to copy the data elements into a new container. The authors provide many useful adaptors which can be used together to produce interesting views of data in a container.

SC 99-42. Tobias Galliat. *Clustering Data of Different Information Levels*.

Abstract: For using Data Mining, especially cluster analysis, one needs measures to determine the similarity or distance between data objects. In many application fields the data objects can have different information levels. In this case the widely used euclidean distance is an inappropriate measure. The present paper describes a concept how to use data of different information levels in cluster analysis and suggests an appropriate similarity measure. An example from practice is included, that shows the usefulness of the concept and the measure in combination with KOHONENS Self-Organizing Map algorithm, a well-known and powerful tool for cluster analysis.

SC 99-43. Werner Benger; Hans-Christian Hege; André Merzky; Thomas Radke; Edward Seidel. *Efficient Distributed File I/O for Visualization in Grid Environments*.

Abstract: Large scale simulations running in metacomputing environments face the problem of efficient file I/O. For efficiency it is desirable to write data locally, distributed across the computing environment, and then to minimize data transfer, i.e. reduce remote file access. Both aspects require I/O approaches which differ from existing paradigms.

For the data output of distributed simulations, one wants to use fast local parallel I/O for all participating nodes, producing a single distributed logi-

cal file, while keeping changes to the simulation code as small as possible. For reading the data file as in postprocessing and file based visualization, one wants to have efficient *partial* access to remote and distributed files, using a global naming scheme and efficient data caching, and again keeping the changes to the postprocessing code small.

However, all available software solutions require the entire data to be staged locally (involving possible data recombination and conversion), or suffer from the performance problems of remote or distributed file systems.

In this paper we show how to interface the HDF5 I/O library via its flexible Virtual File Driver layer to the Globus Data Grid. We show, that combining these two toolkits in a suitable way provides us with a new I/O framework, which allows efficient, secure, distributed and parallel file I/O in a metacomputing environment.

- SC 99-44.** Hugues Marchand; Alexander Martin; Robert Weismantel; Laurence A. Wolsey. *Cutting Planes in Integer and Mixed Integer Programming*. (Paper nur verfügbar unter Technical Report CORE DP9953, Universite Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgium, 1999)

Abstract: This survey presents cutting planes that are useful or potentially useful in solving mixed integer programs. Valid inequalities for i) general integer programs, ii) problems with local structure such as knapsack constraints, and iii) problems with 0-1 coefficient matrices, such as set packing, are examined in turn. Finally the use of valid inequalities for classes of problems with structure, such as network design, is explored.

<http://www.core.ucl.ac.be/wolsey/ShortCV.htm#RECENT>

- SC 99-45.** Tilman Friese; Frank Schmidt; David Yevick. *Transparent Boundary Conditions for a Wide-Angle Approximation of the One-Way Helmholtz Equation*.

Abstract: We present nonlocal discrete transparent boundary conditions for a fourth-order wide-angle approximation of the two-dimensional Helmholtz equation. The boundary conditions are exact in the sense that they supply the same discrete solution on a bounded interior domain as would be obtained by considering the problem on the entire unbounded domain with zero boundary conditions at infinity. The proposed algorithm results in an unconditionally stable propagation method. Numerical examples from optics illustrate the efficiency of our approach.

- SC 99-46.** Frank Schmidt; Tilmann Friese; David Yevick. *Transparent Boundary Conditions for Split-Step Padé Approximations of the One-Way Helmholtz Equation*.

Abstract: In this paper, we generalize the nonlocal discrete transparent boundary condition introduced by Schmidt and Deuffhard [Comp. Math. Appl. **29** (1995) 53-76] and Schmidt and Yevick [J. Comput. Phys. **134** (1997) 96-107] to propagation methods based on arbitrary Padé approxi-

mations to the two-dimensional one-way Helmholtz equation. Our approach leads to a recursive formula for the coefficients appearing in the nonlocal condition which then yields an unconditionally stable propagation method.

SC 99-47. Hinnerk Stüben. *Decorrelation of the Topological Charge in Tempered Simulations of Full QCD.*

Abstract: The improvement of simulations of QCD with dynamical Wilson fermions by combining the Hybrid Monte Carlo algorithm with parallel tempering is studied. As an indicator for decorrelation the topological charge is used.

SC 99-48. Christoph Helmberg. *The m -Cost ATSP.*

(Appeared in: G. Cornuejols; R. E. Burkard; G. J. Woegingner, Integer Programming and Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science 1610, Springer 1999, 242-258)

Abstract: Although the m -ATSP (or multi traveling salesman problem) is well known for its importance in scheduling and vehicle routing, it has, to the best of our knowledge, never been studied polyhedrally, i.e., it has always been transformed to the standard ATSP. This transformation is valid only if the cost of an arc from node i to node j is the same for all machines. In many practical applications this is not the case, machines produce with different speeds and require different (usually sequence dependent) setup times. We present first results of a polyhedral analysis of the m -ATSP in full generality. For this we exploit the tight relation between the subproblem for one machine and the prize collecting traveling salesman problem. We show that, for $m \geq 3$ machines, all facets of the one machine subproblem also define facets of the m -ATSP polytope. In particular the inequalities corresponding to the subtour elimination constraints in the one machine subproblems are facet defining for m -ATSP for $m \geq 2$ and can be separated in polynomial time. Furthermore, they imply the subtour elimination constraints for the ATSP-problem obtained via the standard transformation for identical machines. In addition, we identify a new class of facet defining inequalities of the one machine subproblem, that are also facet defining for m -ATSP for $m \geq 2$. To illustrate the efficacy of the approach we present numerical results for a scheduling problem with non-identical machines, arising in the production of gift wrap at Herlitz PBS AG.

SC 99-49. Christoph Helmberg. *Semidefinite Programming.*

Abstract: Due to its many applications in control theory, robust optimization, combinatorial optimization and eigenvalue optimization, semidefinite programming had been in wide spread use even before the development of efficient algorithms brought it into the realm of tractability. Today it is one of the basic modeling and optimization tools along with linear and quadratic programming. Our survey is an introduction to semidefinite programming, its duality and complexity theory, its applications and algorithms.

SC 99-50. Kuberek; Monika. *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Ein innovatives Verbundkonzept für die Region.*

(Erschienen in: 89. Deutscher Bibliothekartag in Freiburg im Breisgau: Grenzenlos in die Zukunft, für Bibliothekswesen und Bibliographie, Sonderheft 77, [Januar] 2000, S. 115-126)

Abstract: Auf dem 89. Deutschen Bibliothekartag, der vom 25. bis 29. Mai 1999 in Freiburg (Breisgau) stattgefunden hat, wurde der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) zum ersten Mal der großen bibliothekarischen Öffentlichkeit vorgestellt. Am KOBV-Stand, der im Rahmen des gemeinsamen Standes der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme organisiert wurde, führte die KOBV-Projektgruppe Funktionalitäten der KOBV-Suchmaschine vor. In der Vortragsreihe zum Themenkreis XI "Neue Entwicklungen in den Verbund- und Lokalsystemen", die unter Mitwirkung der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme veranstaltet wurde, war der KOBV mit einem eigenen Vortrag vertreten: "Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Ein innovatives Verbundkonzept für die Region".

In dem Vortrag hat die Verfasserin einen umfassenden Überblick über das KOBV-Projekt und den bisherigen Projektverlauf gegeben, die Projektziele und den politischen Rahmen erörtert sowie die KOBV-Suchmaschine, das technische Kernstück des neuen Verbundes, vorgestellt. Der hier vorliegende Text ist die schriftlich ausgearbeitete Fassung dieses Vortrages.

SC 99-51. Martin Grötschel; Monika Kuberek; Stefan Lohrum; Joachim Lügger; Beate Rusch. *Die KOBV-Suchmaschine geht in Routinebetrieb.*

Abstract: Im Herbst 1999 nimmt die KOBV-Suchmaschine, das technische "Herzstück" des KOBV, den Routinebetrieb auf. Nach einer kurzen Einführung in die politischen und rechtlichen Grundlagen des KOBV-Projektes werden in diesem Aufsatz die Funktionalitäten der KOBV-Suchmaschine, ihre Leistungen für Bibliotheksbenutzer und Bibliothekare, vorgestellt. Der Aufsatz schließt mit einem Überblick über den bisherigen Projektverlauf und der Erläuterung der wichtigsten Prinzipien des KOBV - Offenheit, Dezentralität und Heterogenität.

SC 99-52. Martin Grötschel; Monika Kuberek; Stefan Lohrum; Joachim Lügger; Beate Rusch. *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg.*

(Erschienen in: ABI TECHNIK - Zeitschrift für Automation, Bau und Technik im Archiv-, Bibliotheks- und Informationswesen, Nr. 4 (4. Vj. 1999), S. 350-367)

Abstract: Im Herbst 1999 ging der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) in Routinebetrieb. In technischer Hinsicht setzt der KOBV auf ein neuartiges, zukunftsweisendes Verbundkonzept, in dem die zentrale Datenbank mit dem Verbundkatalog ersetzt wird durch verteilte Datenbanken und lokale Kataloge, die durch das Netz (Internet)

miteinander verbunden sind. Die zentrale Recherchefunktion wird ersetzt durch die KOBV-Suchmaschine. Beschrieben werden die Hintergründe, die zu diesem Konzept geführt haben, die Kriterien, die die Architekturentscheidungen der Software bestimmt haben, sowie die einzelnen realisierten Komponenten.

SC 99-53. Werner Benger; Hans-Christian Hege; Stefan Heusler. *Visions of Numerical Relativity 1999*.

Abstract: We present visualizations of recent supercomputer simulations from numerical relativity, exploiting the progress in visualization techniques and numerical methods also from an artistic point of view. The sequences have been compiled into a video tape, showing colliding black holes, orbiting and merging neutron stars as well as collapsing gravitational waves. In this paper we give some background information and provide a glance at the presented sequences.

SC-99-54. Martin Grötschel. *Verkehrsplanung: Bessere Lösungen mit Mathematik*.

(Erschienen in: Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Mathematik – Die Verborgene Schlüsseltechnologie, 1999, 11-22)

Abstract: Anwendungen der Mathematik in der Verkehrs- und Transporttechnologie haben eine große und bedeutende Tradition. Natürlich wurden die ersten Fahrzeuge mit der ingenieurmäßigen Methode von Versuch, Irrtum und Verbesserung entworfen. Aber schon sehr bald kamen mathematische Berechnungen hinzu, mit denen mechanische Eigenschaften von Fahrzeugteilen ermittelt und zum Teil optimiert wurden.

Die hierzu erforderliche Mathematik wurde in diesem Jahrhundert zu einem mächtigen Werkzeugkasten ausgebaut.

Mit diesem kann man heute z.B. hocheffiziente Motoren mit geringem Schadstoffausstoß entwerfen, aerodynamisch günstige Fahrzeugprofile ermitteln und Flugzeugflügel berechnen, die die gewünschte Last sicher und mit geringem Treibstoffaufwand tragen.

Die Mathematik unterstützt die Technologie des Verkehrs beginnend bei globalen Designfragen bis hin zur Spezifizierung von Materialeigenschaften kleinster Bauteile; sie berechnet mit hoher Präzision energieoptimale Bahnen von Raumflugkörpern oder zeitoptimale Trajektorien für Flugzeuge, steuert automatische Roboteranlagen oder innerbetriebliche Transportsysteme.

5.2 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
- Mathematical Methods of Operations Research
- Mathematics of Operations Research
- SIAM Journal on Discrete Mathematics
- Surveys on Mathematics for Industry

5.3 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. Gabrielle Allen, Werner Benger, Hans-Christian Hege, Joan Massó, André Merzky, Thomas Radke, Edward Seidel, John Shalf, *Solving Einstein's Equation on Supercomputers*, IEEE Computer, Dec. 1999, p. 52-59.
2. Christos Athanasiadis, Jörg Rambau und Francisco Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes II*, Publications De l'Institut Mathématique, Belgrade **66** (1999), 3–15.
3. Werner Benger, Hans-Christian Hege, André Merzky, Thomas Radke, Edward Seidel, *Efficient Distributed File I/O for Visualization in Grid Environments*, Springer: Lecture Notes in Computational Science and Engineering (in press) (1999)
4. R. Borndörfer, M. Grötschel, F. Klostermeier und C. Küttner, *Telebus Berlin: Vehicle Scheduling in a Dial-a-Ride System*. *Computer-Aided Transit Scheduling* (N. Wilson, Hrsg.), Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer, Berlin (1999), 391–422.

5. R. Borndörfer, A. Löbel, U. Strubbe und M. Völker, *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*. In Heureka '99: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (1999), 171–194.
6. M. Brandl, M. Meyer, J. Sühnel, *Quantum chemical study of a water mediated uracil-cytosine base pair*, J. Am. Chem. Soc. **121** (1999), 2605–2606.
7. M. Brandl, M. Meyer, J. Sühnel, *C-H...O and C-H...N interactions in RNA structures*, Theoret. Chem. Acc. **101** (1999), 103–113.
8. A. Brandt und M. Brandt, *On the $M(n)/M(n)/s$ queue with impatient calls*, Performance Evaluation **35** (1999), 1–18.
9. ———, *On a two-queue priority system with impatience and its application to a call center*, Methodology and Computing in Applied Probability **1** (1999), 191–210.
10. ———, *Approximation for overflow moments of a multiservice link with trunk reservation*, Proceedings of SPIE, Performance and Control of Network Systems III, Boston, USA, Vol. 3841, 1999, 86–93.
11. ———, *On the computation of the probability of a system failure*, Proceedings of ESREL'99, 10th European Conference on Safety and Reliability, TUM München-Garching, (G. I. Schuëller und P. Kafka, Hrsg.), Balkema Rotterdam, 1999, 457–461.
12. ———, *A note on the stability of the many-queue head-of-the-line processor-sharing system with permanent customers*, Queueing Systems **32** (1999), 363–381.
13. M. Brune, A. Keller, A. Reinefeld, *Multi-User System Management on SCI Clusters*. In: H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds), SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters, Springer LNCS 1734, (1999), pp. 443–460.
14. M. Brune, A. Reinefeld, J. Varnholt, *A Resource Description Environment for Distributed Computing Systems*. Procs. 8th International Symposium on High Performance Distributed Computing HPDC-8, Redondo Beach, CA, 1999, pp. 279–286.
15. M. Brune, J. Gehring, A. Reinefeld, *Linking Message Passing Environments*. In: Rajkumar Buyya (ed.), High Performance Cluster Computing, Volume 2: Programming and Applications, Prentice Hall, NJ, 1999, pp. 87–100.
16. M. Brune, J. Gehring, A. Keller, A. Reinefeld, *Specifying Resources and Services in Metacomputing Systems*. In: Rajkumar Buyya (ed.), High Performance Cluster Computing, Volume 1: Architectures and Systems, Prentice Hall, NJ, 1999, pp. 186–200.

17. W. Bruns, J. Gubeladze, M. Henk, A. Martin und R. Weismantel, *A Counterexample to an Integer Analogue of Carathéodory's Theorem*, Journal für die Reine und Angewandte Mathematik **510** (1999), 179–185.
18. R. Bywater, J. Gehring, A. Reinefeld, F. Rippmann, A. Weber, *Meta-computing in Practice: A Distributed Server for Pharmaceutical Industry*. Future Generation Computer Systems. Special Issue on Metacomputing, W. Gentzsch (ed.), Elsevier Publisher, Vol. 15, No. 5/6, 1999.
19. G. Dahl, A. Martin und M. Stoer, *Routing through Virtual Paths in Layered Telecommunication Networks*, Operations Research **47** (1999), 693–702.
20. P. Deuffhard: *Commentary on Cornelius Lanczos's Extended Boundary Value Problems*. In: W.R. Davis, M.T. Chu, P. Dolan, J.R. McConnell, L.K. Noris, E. Ortiz, R.J. Plemmons, D. Ridgeway, B.K.P. Scaife, W.J. Stewart, J.W. York, Jr., W.O. Doggett, B.M. Gellai, A.A. Gsponer, C.A. Prioli (eds.), Cornelius Lanczos Collected Published Papers with Commentaries, North Carolina State University, Raleigh, Vol. VI, pp. 3-650 - 3-653 (1999).
21. P. Deuffhard: *Commentary on Cornelius Lanczos's Solution of Ordinary Differential Equations by Trigonometric Interpolation*. In : W.R. Davis, M.T. Chu, P. Dolan, J.R. McConnell, L.K. Noris, E. Ortiz, R.J. Plemmons, D. Ridgeway, B.K.P. Scaife, W.J. Stewart, J.W. York, Jr., W.O. Doggett, B .M. Gellai, A.A. Gsponer, C.A. Prioli (eds.), Cornelius Lanczos Collected Published Papers with Commentaries, North Carolina State University, Raleigh, Vol. VI, pp. 3-667 – 3-669 (1999).
22. P. Deuffhard, R. Felix, P. Wust: *Wärme für das Leben. Mathematische Hyperthermieplanung am virtuellen Krebspatienten*. In: D. Hömberg (ed.), 8. Veranstaltungsreihe Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Angewandte Mathematik - die verborgene Schlüsseltechnologie, pp. 23-29 (1999).
23. P. Deuffhard, Ch. Schütte, F. Cordes, L. Müller-Kurth: *Konformationsdynamik. Mathematischer Entwurf hochspezifischer Biomoleküle*. In: D. Hömberg (ed.), 8. Veranstaltungsreihe Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Angewandte Mathematik - die verborgene Schlüsseltechnologie, pp. 30-34 (1999).
24. P. Deuffhard, M. Seebass: *Adaptive Multilevel FEM as Decisive Tools in the Clinical Cancer Therapy Hyperthermia*. In: Choi-Hong Lai, Peter E. Bjørstad, Mark Cross and Olof O. Widlund (eds.), Procs. Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods, DDM-org Press, Bergen, pp. 403-414 (1999).
25. A. Fischer, F. Cordes, and Ch. Schütte, *Hybrid Monte Carlo with adaptive temperature choice: efficient conformational analysis of RNA*, Comput. Phys. Comm. **121–122** (1999), 37–39.

26. M. Fischer, A. Reinefeld, *PVM for SCI Clusters*. In: H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*, Springer LNCS 1734, (1999), pp. 239–248.
27. K. Gatermann and F. Guyard. Gröbner bases, invariant theory and equivariant dynamics. *J. Symb. Comp.*, 28:275–302, 1999.
28. M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, D. Pleiter, P. Rakow, G. Schierholz, A. Schiller, P. Stephenson und H. Stüben, *Mass Spectrum and Decay Constants in the Continuum Limit* Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 73 (1999), 237–239.
29. Jörg Gotthardt, Carola Blömer, Detlev Stalling, *Visualization of groundwater flow using line integral convolution*, Proc. ModelCARE’99, ETH Zürich (1999)
30. M. Grötschel, *My Favorite Theorem: Characterizations of Perfect Graphs*, OPTIMA—Mathematical Programming Society Newsletter (1999), Nr. 62, 2–5.
31. M. Grötschel, *Verkehrsplanung: Bessere Lösungen mit Mathematik* Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie, 1999, 11–22.
32. M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau, *Wo bleibt der Aufzug?* OR News, März 1999, 1–6.
33. M. Grötschel, M. Padberg, *Die optimierte Odyssee*, Spektrum der Wissenschaft, Nr. 4 (1999), 11–13, und Spektrum der Wissenschaft, Digest (1999), Nr. 2, 32–41.
34. M. Grötschel, M. Kuberek, S. Lohrum, J. Lügger, B. Rusch, *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin–Brandenburg*, ABI Technik (1999), Nr. 4, 350–367.
35. M. Grötschel, J. Lügger, *Scientific Information Systems and Metadata, Classification in the Information Age* (W. Gaul, H. Locarek-Junge, Hrsg.), Springer, Berlin, 1999, 3–20.
36. C. Helmberg, *The m -Cost ATSP*, Integer Programming and Combinatorial Optimization (G. Cornuéjols, R. E. Burkard und G. J. Woeginger, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science 1610, Springer, Juni 1999, 242–258.
Wilhelm Huisinga, Christoph Best, Rainer Roitzsch, Christof Schütte, und Frank Cordes, *From simulation data to conformational ensembles: Structure and dynamic based methods*, *J. Comp. Chem.* **20** (1999), no. 16, 1760–1774.
37. A. Keller, M. Brune, A. Reinefeld, *Resource Management for High-Performance PC-Clusters*. HPCN’99, Amsterdam, 12.–14.04.1999, pp. 270–280.

38. A. M. C. A. Koster, C. P. M. van Hoesel, and A. W. J. Kolen, *Optimal solutions for a frequency assignment problem via tree-decomposition*, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 1999, 338–349.
39. ———, *Solving frequency assignment problems via tree-decomposition*, Electronic Notes on Discrete Mathematics **3** (1999), online¹ erhältlich.
40. S. O. Krumke, M. V. Marathe, H. Noltemeier, R. Ravi, S. S. Ravi, R. Sundaram und H. C. Wirth, *Improving minimum cost spanning trees by upgrading nodes*, Journal of Algorithms **33** (1999), 92–111.
41. S. O. Krumke, M. V. Marathe, H. Noltemeier, R. Ravi, S. S. Ravi, R. Sundaram und H.-C. Wirth, *Improving spanning trees by upgrading nodes*, Theoretical Computer Science **221** (1999), 139–155.
42. M. Kuberek: *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Ein innovatives Verbundkonzept für die Region*, Vortrag auf dem 89. Deutschen Bibliothekartag, 25. - 29. Mai 1999 in Freiburg (Breisgau). In: 89. DEUTSCHER BIBLIOTHEKARTAG in Freiburg im Breisgau 1999, ZfBB, Sonderheft **77**, [Jan.] 2000, S. 115 - 126. auch: ZIB SC 99-50
43. M. Kuberek (Red.): *Gemeinsamer KOBV-Standard*. In: BIBLIOTHEKSDIENST 33 (1999), Heft **11**, S. 1863-1873, auch: SC 99-14, ZIB, 1999.
44. J. Lang, *Adaptive Multilevel Solutions of Nonlinear Parabolic PDE Systems*, Proceedings of the Third European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH'99, Finland).
45. J. Lang, B. Erdmann, M. Seebass, *Impact of Nonlinear Heat Transfer on Temperature Distribution in Regional Hyperthermia*, IEEE Transaction on Biomedical Engineering 46 (1999) 1129–1138.
46. A. Lari-Lavassani, W.F. Langford, K. Huseyin, and K. Gatermann. Steady-state mode interactions for D_3 and D_4 -symmetric systems. *Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems*, 6:169–209, 1999.
47. A. Löbel, *Solving Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems* Computer-Aided Transit Scheduling (N. H. M. Wilson, Hrsg.), 193–220, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer (1999), 193–220.
48. W. Merz, J. Lang, *Analysis and Simulation of Two-Dimensional Dopant Diffusion in Silicon*, Proceedings of the First Caesarium (17.–19.11.99, Bonn).
49. André Merzky, *Visuelle Kontrolle und Steuerung von verteilten Anwendungen auf Höchstleistungsrechnern*, Tagungsbroschüre HLRN-Workshop: "Wissenschaftliche Anwendungen auf Höchstleistungsrechnern", (in press) (1999).

¹<http://www.elsevier.nl/locate/endm/>

50. M. Meyer, *Protein interactions*, in: H.-J. Rehm, G. Reed (eds.), *Biotechnology*, Vol. 5a, Wiley-VCH, Weinheim 1999, pp. 88-108.
51. Jacek Nadobny, Waldemar Wlodarczyk, Peter Wust, Gerhard Mönich, Peter Deuffhard und Roland Felix, *3D phased array applicator for hyperthermia treatment in pelvis*, Proc. XXVIth General Assembly of International Union of Radio Science (URSI), August, 13-21, 1999, Toronto, Ontario, Canada
52. W. Neun, *Some examples for parallel computations using REDUCE* (in Russisch) *Fundamentalnaya I Prikladnaya Matematika* **5** (1999).
53. K. Penke, D. Scharna J. Willenborg: *Bibliotheksverzeichnisse zur Auswahl von Bibliotheksbeständen in verteilten Informationssystemen - Untersuchung und Einsatz im Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*. In: BIBLIOTHEKSDIENST **33** (1999), Heft **10**, S. 1667 - 1698.
54. Karlheinz Rein, Malte Zöckler, and Martin Heisenberg, *A Quantitative Three-dimensional Model of the Drosophila Optic Lobes*, *Current Biology*, Vol. 9 No. 2 (1999), 93–96.
55. Ch. Schütte, A. Fischer, W. Huisinga, and P. Deuffhard, *A Direct Approach to Conformational Dynamics Based on Hybrid Monte Carlo*, *J. Comput. Phys.* **151** (1999), 146–168.
56. J. Simon, A. Reinefeld, O. Heinz, *Large-Scale SCI Clusters in Practice: Architecture and Performance*. In: H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*, Springer LNCS 1734, (1999), pp. 367–380.
57. M. C. Steinbach, *Recursive direct algorithms for multistage stochastic programs in financial engineering*, *Operations Research Proceedings 1998* (P. Kall und H.-J. Lüthi, Hrsg.), Springer, 1999, 241–250.
58. G.D. van Albada, J. Clinckemaillie, A. Emmen, J. Gehring, O. Heinz, F. van der Linden, B.J. Overeinder, A. Reinefeld, P.M.A. Sloot, *Dynamite-Blasting Obstacles to Parallel Cluster Computing*. HPCN 1999, Amsterdam, pp. 300–310.
59. Detlev Stalling, Martin Seebass, Stefan Zachow, *Mehrschichtige Oberflächenmodelle zur computergestützten Planung in der Chirurgie*, in *Bildverarbeitung für die Medizin 1999 - Algorithmen, Systeme, Anwendungen*, Evers, Glombitza, Lehmann, Meinzer (Hrsg.), Springer-Verlag, Berlin, 1999, S. 203–207.
60. A. Wagler, *On critically perfect graphs*, *Journal of Graph Theory* **32** (1999), 394–404.
61. A. Wagler, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, *Discrete Applied Mathematics* **95** (1999), 455–466.

62. Waldemar Wlodarczyk, Jacek Nadobny, Peter Wust, Gerhard Mönich, Peter Deuffhard und Roland Felix *Systematic design of antennas for cylindrical 3D phased array hyperthermia applicator*, Proc. 1999 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium, July 11-16 1999, Orlando, FL, USA
63. P. Wust, R. Felix, P. Deuffhard: *Künstliches Fieber gegen Krebs*. Spektrum der Wissenschaft, pp. 78-84 (Dezember 1999).
64. Peter Wust, Jacek Nadobny, Martin Seebass, Detlev Stalling, Johanna Gellermann, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, Roland Felix, *Influence of patient models and numerical methods on predicted power deposition patterns*, Int. J. Hyperthermia 15, 1999, pp. 519-540.
65. Stefan Zachow, Tim C. Lueth, Detlev Stalling, Andreas Hein, Martin Klein und Horst Menneking, *Optimized Arrangement of Osseointegrated Implants: A Surgical Planning System for the Fixation of Facial Protheses*, in *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS'99)*, Lemke, Vannier, Inamura, Farman (Hrsg.), Elsevier Science B.V., 1999, pp. 942–946.

5.4 Monographien

1. W.W. Baumann, F. Thiele, *Finite-Volumen-Methode in der Numerischen Thermofluidodynamik*, Manuskript zur gleichnamigen Vorlesung, Hermann-Föttinger-Institut, TU Berlin, 3. Ausgabe (1999), 97 Seiten.
2. H. Hellwagner, A. Reinefeld (eds.), *SCI: Scalable Coherent Interface. Architecture and Software for High-Performance Compute Clusters*. Springer State-of-the-Art Surveys LNCS 1734, 1999, ISBN 3-540-66696-6.
3. A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment—Models and Algorithms*, Dissertation, Universiteit Maastricht, Niederlande, 1999. (ISBN 90-9013119-1)
4. F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, Dissertation, TU Berlin, Shaker, Aachen, 1999. (ISBN 3-8265-6450-2)

5.5 Habilitationen

Freie Universität Berlin

Karin Gatermann (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)
Computer Algebra Methods for Equivariant Dynamical Systems
 Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Jens Lang (Abt. Wissenschaftliche Software)

Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems. Theory, Algorithm, and Applications

Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Christof Schütte (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Conformational Dynamics: Modelling, Theory, Algorithm and Application to Biomolecules

Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

5.6 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Detlev Stalling (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Fast Texture-Based Algorithms for Vector Field Visualization

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Regina Urbaniak (Abt. Optimierung)

Decomposition of Generating Sets and of Integer Programs

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Universität Paderborn

Jens Simon (Abt. Computer Science Research)

Werkzeugunterstützte effiziente Nutzung von Hochleistungsrechnern

Betreuer: Alexander Reinefeld (Universität Paderborn und ZIB)

5.7 Diplomarbeiten

Freie Universität Berlin

Martin Holz (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Quantenklassische Simulation zur Photodissoziation von HF in einer Argon-Matrix

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Lin Zschiedrich (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Dispersion und klassischer Grenzfall von Integratoren für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin**Utz-Uwe Haus** (Abt. Optimierung)*Gitterpackungen konvexer Körper*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Wolfram Schneider (Abt. Wissenschaftliche Informationssysteme)*Ein verteiltes Bibliotheks-Informationssystem auf der Basis des Z 39.50 Protokolls*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB), Erhard Konrad (TU Berlin)

Oliver Thielepape (Abt. Optimierung)*Ein-Maschinen-Scheduling-Polytope und supermodulare Funktionen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Alexander Gerhardt (Abt. Optimierung)*Polyedrische Untersuchungen zu 2-Maschinen-Scheduling-Problemen mit Antiparallelitätsbedingungen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Thomas Lange (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Regionenbasierte Segmentierungsverfahren für dreidimensionale biomedizinische Bilddaten*

Betreuer: Jens Gustedt, Hans-Christian Hege (TU Berlin und ZIB)

Natascha Westerhoff (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Geometrische Methoden zur 3D-Segmentierung*

Betreuer: Ulrich Pinkall, Konrad Polthier, Hans-Christian Hege (TU Berlin und ZIB)

Stefan Zachow (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Entwurf und Implementierung eines chirurgischen Planungssystems für den Einsatz in der Epithetik*

Betreuer: Heinz U. Lemke, Tim C. Lüth, Detlev Stalling (TU Berlin und ZIB)

Universität Paderborn**Jörg Varnholt** (Abt. Computer Science)*Ein objektorientiertes Modell zur Spezifikation von Ressourcen und Diensten in heterogenen Systemen*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

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 Weiterentwicklung der LIMEX-Software zur Lösung von differentiell-algebraischen Systemen mit linear-impliziten Extrapolationstechniken.

6.5 Amira

Verfügbar: <http://amira.zib.de>

Ansprechpartner: Malte Zöckler

AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Modellierung und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Bei der Implementierung wurden moderne Programmier-techniken und Grafikstandards bzw. Defacto-Standards wie z.B. C++, Motif, Qt, OpenGL und OpenInventor verwendet. Ein generischer Programmkern kann dynamisch um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für viele Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren. Kooperationspartner des ZIB können die Software kostenfrei erhalten.

Eine professionelle End-User-Version mit einem ausgewählten Satz von Modulen wird kommerziell von der Firma Indeed-Visual Concepts GmbH² angeboten – derzeit für die Betriebssysteme IRIX, SUN Solaris, HP-UX, Linux und Windows NT4, 95, 98. Im Sommer 2000 soll auch eine erweiterbare, kommerzielle Version erscheinen.

6.6 HyperPlan

Ansprechpartner: Detlev Stalling

HyperPlan ist eine fachspezifische Erweiterung des oben beschriebenen Softwaresystems *Amira*. Das System dient dazu, Hyperthermie-Behandlungen in der Krebstherapie computer-gestützt vor auszuplanen. *HyperPlan* enthält Komponen-

¹<http://www.zib.de/SciSoft/CodeLib/>

²<http://www.indeed3d.de/>

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

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

6.7 DOC++

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

Ansprechpartner: Malte Zöckler

DOC++ ist ein Tool zur Dokumentation von C-, C++- und Java-Programmen. Es extrahiert Information aus Header-Files und wandelt diese in HTML-Text für online-Dokumentation bzw. LaTeX für qualitativ hochwertige Ausdrücke. DOC++ ist unter <http://www.zib.de/Visual/software/doc++> frei erhältlich.

6.8 VTL

Verfügbar: <http://www.zib.de/weiser/vtl/>

Ansprechpartner: Martin Weiser

Die C++-Bibliothek VTL (Views Template Library) bildet eine dünne Abstraktionsschicht über der Standard Template Library. Sie stellt verschiedene dynamisch berechnete Sichten auf Datensätze zur Verfügung, so daß auf Untermengen oder abgewandelte Daten zugegriffen werden kann, ohne die zugrundeliegenden Datensätze zu kopieren. Durch die Verwendung moderner Template-Techniken wird dabei eine besonders hohe Flexibilität in der Anwendung ermöglicht. VTL ist frei erhältlich.

6.9 iTe

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

Ansprechpartner: Georg Sokrobohatyj

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. Unter <http://www.zib.de/Visual/software/ite> ist die aktuelle Version 2.02 verfügbar.

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 1999 wurde die Version 3.7 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Rußland), Queen Mary and Westfield College (London), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Software-Händler in Japan, Korea und Polen.

An vielen Modulen wurden im Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der neuen REDUCE version 3.7.

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)
MATHML	Interface zu MathML (L. Alvarez)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)
NORMFORM	Normalformen von Matrizen (M. 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: <i>Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation.</i>

D Maple

Ansprechpartner: Karin Gatermann

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

moregroebner Version 3.1 (K. Gatermann) Maple V.5–Paket zur Berechnung von Gröbner–Basen von Idealen und Modulen, Hilbert-Reihen.

symmetry Version 3.1 (K. Gatermann, F. Guyard) Maple V.5 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik.

6.11 Verfahren aus der Optimierung

MCF

Ansprechpartner: Andreas Löbel

Verfügbar: <http://www.zib.de/Optimization/Software/Mcf>

MCF ist eine Implementierung eines primalen und dualen Netzwerk-Simplex-Algorithmus zur Lösung linearer Netzwerk-Fluß-Probleme. Für eine akademische Nutzung ist MCF frei verfügbar.

MCF wurde evaluiert anhand mehrere Klassen verschiedener mit NETGEN erzeugter Standardprobleme und mit Instanzen realer Anwendungen aus der Fahrzeugeinsatzplanung im ÖPNV und der Telekommunikation. Rechentests auf diesen Beispielen zeigten immer ein hervorragendes Laufzeitverhalten von MCF. Selbst riesige Praxisinstanzen mit mehreren tausend Knoten und hundertmillionen Bögen können innerhalb kürzester Zeit optimal gelöst werden.

MCF findet derzeit eine kommerzielle Anwendung in verschiedenen Bereichen. Neben Integrationen in verschiedenen Planungssystemen für den ÖPNV wurde MCF als einer der Integer-Benchmarks in die kommerzielle SPEC CPU 2000 Suite aufgenommen (siehe auch <http://www.spec.org>).

6.12 Informationsdienste des eLib–Servers

Verfügbar: <http://elib.zib.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

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 Ma-*

*thematical Union (IMU)*³. 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*⁴. 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*⁵ angeboten, die auch zu den Kernbestandteilen des Math-Net⁶ gehören.

Der deutsche Mirror der *Netlib*⁷ erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker 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 Überblick.⁸

Die ZIB-Suchmaschine⁹ zum Auffinden lokaler Dokumente, die über den ZIBIS-Server¹⁰ zugänglich sind, ist ebenfalls mit dem Harvest-System realisiert worden und Teil des eLib-Services.

Das Opt-Net als elektronisches Forum¹¹ für Optimierer besteht seit 1993. Umfangreiche Arbeiten sind im Berichtszeitraum für die Analyse und Portierung der Software an neuere Rechnerarchitekturen aufgewendet worden.

6.13 Fremd- und Normdatenserver

Verfügbar: beschränkter Zugriff nur für KOBV-Bibliotheken

³<http://elib.zib.de/IMU/>

⁴<http://elib.zib.de/ICM98/>

⁵<http://www.math-net.de/links/>

⁶<http://www.math-net.de/>

⁷<http://elib.zib.de/netlib/>

⁸<http://www.math-net.de/search/mibb/>

⁹<http://www.zib.de/suche/>

¹⁰<http://www.zib.de/>

¹¹<mailto:opt-net-request@zib.de>; Subject: Help

Ansprechpartner: Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Beate Rusch

Im KOBV-Projekt wurde der Fremd- und Normdatenserver aufgebaut, der folgende Daten enthält: bibliographische Datensätze aus der Deutschen Nationalbibliographie (DNB) seit 1986 (Reihen A, B, H, M, N, T) sowie die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND), Schlagwortnormdatei (SWD). Die Daten werden wöchentlich aktualisiert. Die Fremd- und Normdaten werden von den KOBV-Bibliotheken über eine interne Aleph-Schnittstelle oder über Z39.50 in das eigene lokale Bibliothekssystem kopiert und dort weiter verarbeitet. Aus lizenzrechtlichen Gründen ist die Nutzung nur für KOBV-Bibliotheken gestattet. Dieser Service wird von der KOBV-Projektgruppe am ZIB zur Verfügung gestellt.

6.14 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.

6.15 KOBV-Suchmaschine

Verfügbar: <http://www.kobv.de/suche>

Ansprechpartner: Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Beate Rusch, Monika Lill

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de/suche> wird seit 05. November 1999 die KOBV-Suchmaschine des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) bereitgestellt, die im Rahmen des KOBV-Projektes am ZIB entwickelt wurde. Mit Hilfe der KOBV-Suchmaschine können Nutzer über das WWW in Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken recherchieren; Bibliothekare können über Z39.50 bibliographische Datensätze in ihre lokalen Systeme übernehmen. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig ausgebaut und neue Bibliotheken in den Service eingebunden. Diese Dienstleistung stellt die KOBV-Projektgruppe am ZIB bereit.

6.16 WWW-Z39.50 Gateway

Verfügbar: ZACK-beschränkter Zugriff

Ansprechpartner: Stefan Lohrum

Das im Rahmen einer Diplomarbeit entwickelte WWW-Z39.50-Gateway ermöglicht einen verteilten Zugriff auf deutsche Bibliotheksdatenbanken, die über das Z39.50 Protokoll ansprechbar sind. Das Ergebnis sind strukturierte Datensätze, die in das jeweilige Bibliothekssystem übernommen werden können. Darüberhinaus bietet ZACK eine verteilte Suche mit Dublettenkontrolle an. Am ZIB wird für KOBV-Bibliotheken über das Gateway auch der lizenzrechtlich beschränkte Zugriff auf die Daten der Deutschen Bibliothek ermöglicht. Eine frei zugängliche Version von ZACK¹² liegt in Braunschweig.

6.17 Math-Net Informationsserver

Verfügbar: <http://www.math-net.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz, Wolfram Sperber

Unter der WWW-Adresse <http://www.math-net.de> befindet sich das Portal des Math-Net. Es dient damit als erste Anlaufstelle, um die dezentral bereitgestellten Dienste innerhalb der Math-Net-Initiative aufzurufen. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste SIGMA (Gesamtindex), Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software betreut. Im Berichtszeitraum wurden weiterhin erste Dokumentationen zu diesen Dienste erstellt.

6.18 Informationsdienste des eLib-Servers

Verfügbar: <http://elib.zib.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz

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

Der deutsche Spiegel der *Netlib*¹³ erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten. Zur effizienten Suche ist die *Netlib* mit Dublin Core Metadaten erschlossen.

Die Indexierung der in der Region Berlin-Brandenburg verfügbaren mathematischen WWW-Server mit Hilfe des *Harvest-Systems* erlaubt die gezielte Suche

¹²<http://www.biblio.tu-bs.de/zack/>

¹³<http://elib.zib.de/netlib/>

nach elektronisch vorhandenen Ressourcen¹⁴.

Die ZIB-Suchmaschine¹⁵ zum Auffinden lokaler Dokumente, die über den ZIBIS-Server¹⁶ zugänglich sind, ist ebenfalls mit dem Harvest-System realisiert worden und Teil des eLib-Services.

Die vorgenannten Dienste sind Bestandteile des hierarchisch organisierten Gesamtindex SIGMA des Math-Net¹⁷.

Eine umfangreiche Sammlung von Links auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World*¹⁸ angeboten, die ebenfalls zu den Kernbestandteilen des Math-Net gehören.

Das Opt-Net als elektronisches Forum¹⁹ für Optimierer besteht seit 1993. Umfangreiche Arbeiten sind im Berichtszeitraum für die Analyse und Portierung der Software an neuere Betriebssystemarchitekturen aufgewendet worden.

Der IMU-Server beinhaltet die elektronischen Ressourcen der *International Mathematical Union (IMU)*²⁰, der durch die Kooperation mit der *European Mathematical Society (EMS)* in 4 Kontinente auf weltweit 34 verteilte Server gespiegelt wird. Neben den allgemeinen Informationen beinhaltet der IMU-Server auch die neuesten Bulletins der verschiedenen Kommissionen der IMU, wie die *International Commission of Mathematical Instruction (ICMI)*, die *Commission on Development and Exchange (CDE)* und die *International Commission on the History of Mathematics (ICHM)*. Im Berichtszeitraum wurde die Masterfunktion des Servers an das Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA) in Rio de Janeiro, Brasilien, übertragen²¹.

Der ICM'98-Server (siehe auch Kapitel 3.2.2) informiert weiterhin über den im Jahre 1998 in Berlin stattgefundenen *International Congress of Mathematicians*²². Obwohl die Konferenz beendet ist, soll dieser Server zu Demonstrations- und Dokumentationszwecken weiterhin zugänglich bleiben. Im Berichtszeitraum wurde der Server ebenfalls zur langfristigen Archivierung bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDG) implementiert²³.

¹⁴<http://www.math-net.de/search/mibb/>

¹⁵<http://www.zib.de/suche/>

¹⁶<http://www.zib.de/>

¹⁷<http://www.math-net.de/>

¹⁸<http://www.math-net.de/links/>

¹⁹<mailto:opt-net-request@zib.de>; Subject: Help

²⁰<http://elib.zib.de/IMU/>

²¹<http://www.mathunion.org/>

²²<http://elib.zib.de/ICM98/>

²³<http://webdoc.gwdg.de/ICM98/>

6.19 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 3.2.5 zu finden.

Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Wolfgang Baumann

26.07.1999 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB

10.11.1999 *Simulationen im Bereich der Strömungsmechanik (CFD — Computational Fluid Dynamics)*

Besuch des Leistungskurses Mathematik des Schiller-Gymnasiums Berlin im ZIB

23.11.1999 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der TU Berlin im ZIB

21.12.1999 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB

Werner Bengler

06.09.1999 *Numerische Relativitätstheorie - der Film*

Tagung „Aktuelle Entwicklungen der Gravitationstheorie“, Physikzentrum Bad Honnef, 06.-08. September

01.10.1999 *Thorn IsoSurfacer, Amira and Web Cactus*

Cactus Workshop, Sept. 27 - Oct. 1, NCSA, Urbana-Champaign (IL), USA

15.12.1999 *Tele-Immersion: Kollision Schwarzer Löcher*

Anwendertreffen der Projekte zum Gigabit-Testbed des DFN, ZIB (inkl. Demonstration, mit Hans-Christian Hege und Thomas Radke)

Andreas Bley

19.02.1999 *Planungen zum Aufbau eines Gigabit-Wissenschaftsnetzes in Deutschland*

Workshop DFN-Verein, Berlin

01.03.1999–31.05.1999

Gastaufenthalt am Computational Optimization Research Center, Industrial Engineering and Operations Research Department, Columbia University, New York, USA

Ralf Borndörfer

03.03.1999 *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*

Heureka'99: Optimierung in Verkehr und Transport, Karlsruhe

25.03.1999 *Übersicht über die Dienstplanoptimierung*

1. MICROBUS Arbeitskreis, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

29.04.1999 *The Berlin Telebus*

Workshop „Verso Nuovi Servizi di Taxi Collettivo“, ENEA, Rom, Italien

01.09.1999 *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*

Symposium über Operations Research 1999, Magdeburg

02.09.1999 *Relations Among Some Combinatorial Programs*

Symposium über Operations Research 1999, Magdeburg

09.09.1999 *Mathematik und Verkehr – Kombinatorische Optimierung bei Transportproblemen*

Jahrestagung der Deutschen Mathematiker Vereinigung (DMV), Mainz

14.10.1999 *Optimization with IntraCity*

IVU Traffic Technologies AG, Berlin

28.10.1999 *Umlaufoptimierung und Dienstplanoptimierung – Die neuen Module in Microbus*

12. MICROBUS Treffen, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

10.11.1999 *Operational Planning Trends in Public Transport*

Tagung „Verkehrsoptimierung“, Oberwolfach

15.11.1999 *Umlaufoptimierung und Dienstplanoptimierung – Die neuen Module in Microbus*

Entwicklerrunde, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

25.11.1999 *Optimization in Public Transport*

Carmen System AB, Göteborg, Schweden

Manfred Brandt

20.09.1999 *Approximation for Overflow Moments of a Multiservice Link with Trunk Reservation*

Performance and Control of Network Systems III, Part of SPIE's Inter-

national Symposium on Voice, Video, and Data Communications, Boston, USA

Frank Cordes

09.03.1999 *Konformationsdynamik von Biomolekülen: Kopplung von Simulation und Analyse*

Charite Berlin, AG Schneider-Mergener

15.10.1999 *Konformationsdynamik und Docking*

AnalytiCon AG Potsdam, Statustreffen

29.10.1999 *Konformationsdynamik von Biomolekülen*

Humboldt-Universität zu Berlin, BioInfo Treffen

Wolfgang Dalitz

27.04.1999 *Math-Net: Ein Informationssystem von und für die Mathematik*

Besuch einer Studiengruppe "Informationsmanagement" der TU Berlin, ZIB, Berlin

13.04.1999 *Math-Net: A Network for Mathematicians*

Visit from University Utrecht, NL, ZIB, Berlin

21.03.1999 *Math-Net: Eine Bilanz*

IuK-Tagung der wissenschaftlichen Fachgesellschaften, Universität Jena

02.03.1999 *Technical Remarks on ICM'98*

Beijing University, Beijing, China

Peter Deuffhard

10.01.99 *A new direct computational approach to conformational dynamics*

Vortrag: Erwin-Schrödinger-Institute, Wien

10.02.99 *Neue algorithmische Konzepte zur Molekülsimulation*

Vortrag: GVC/DECHEMA, Düsseldorf

17.02.99 *Mathematik im Dienste der Krebstherapie. Optimale Therapieplanung am virtuellen Patienten*

Öffentlicher Vortrag: BMBF-Statusseminar, Schloß Erlangen

30.04.99 *Der virtuelle Krebspatient*

Öffentlicher Vortrag: Forschungspolitischer Dialog in Berlin, ZIB

26.05.99 *From molecular dynamics to conformational dynamics. First steps towards a virtual RNA lab*

Invited Talk: International Workshop "Scientific Computing in Chemical Engineering II (SCCE II)", TUHH, Hamburg-Harburg

- 29.05.99** *Mathematik auf der Titanic*
Öffentlicher Vortrag: Tag der Mathematik, Berlin
- 22.–26.06.99** *New computational concepts, adaptive differential equation solvers, and virtual labs*
Vortragsreihe (5 Vorträge): European summer school, CIME, Martina Franca, Italy
- 06.07.99** *Affinvarianz-Klassen nichtlinearer Probleme und adaptive Newton-Algorithm*
Kolloquiumsvortrag: Fakultät für Mathematik, TU München
- 14.07.99** *Numerik der Maxwell-Gleichungen: vom Indiskreten zum Diskreten*
Kolloquiumsvortrag anlässlich des 60. Geburtstages von Prof. Gajewski, WIAS Berlin
- 27.09.99** *From molecular dynamics to conformational dynamics in drug design. First steps towards a virtual lab*
Kolloquiumsvortrag: Princeton University, USA
- 28.09.99** *From molecular dynamics to conformational dynamics in drug design*
Kolloquiumsvortrag: Lawrence Berkeley National Laboratories, USA
- 01.10.99** *The ZIB – mission and selected computational mathematics projects*
Kolloquiumsvortrag: Simon Fraser University, Vancouver, Canada
- 13.10.99** *Konformationsdynamik. Neue mathematische Methoden zum Entwurf hochspezifischer Biomoleküle*
Kolloquiumsvortrag: Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH (GSF), Neuherberg
- 03.11.99** *Virtuelle Welten: Simulationen der Wirklichkeit*
Vortrag: Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaft, Berlin
- 09.11.99** *Adaptive Multilevel-Methoden in der Therapieplanung am virtuellen Krebspatienten*
Kolloquiumsvortrag: Universität Paderborn
- 16.11.99** *Numerik gewöhnlicher Differential-Gleichungen (Teil I)*
PIK, Potsdam
- 23.11.99** *Numerik gewöhnlicher Differential-Gleichungen (Teil II)*
PIK, Potsdam
- 22.11.99** *From molecular dynamics to conformational dynamics in biomolecular design*
Kolloquiumsvortrag: MPI für biophysikalische Chemie, Göttingen
- 01.12.99** *Von der Moleküldynamik zur Konformationsdynamik*
Vortrag: Roche Diagnostics GmbH, Penzberg

Andreas Eisenblätter

- 12.01.1999** *Assigning Frequencies in GSM-Networks*
Combinatorial Optimization Workshop, Oberwolfach
- 20.01.1999** *Analysis of C/I-ratio Thresholds for Frequency Planning*
COST 259, Thessaloniki, Griechenland
- 20.01.1999** *Public Benchmark on FAP*
COST 259, Thessaloniki, Griechenland
- 23.06.1999** *Assigning Frequencies by Local Search*
Forschungsseminar Algorithmen und Komplexität, HU Berlin
- 28.07.1999** *Frequency Planning for GSM-Networks*
INFORMS Applied Probability Conference, Ulm
- 22.09.1999** *Assigning Channels with Little Interference in GSM-Networks*
AIRO, Neapel, Italien

Marlies Engelke

- 21./22.07.1999** *Beratung beim Aufbau einer PKI (Public Key Infrastruktur)*
Zahnradfabrik, Passau

Hans-Hermann Frese

- 25.05.1999** *Performance Evaluation of MPI and MPICH on the Cray T3E*
41st Cray User Group Conference, Minneapolis, Minnesota, USA

Alexander Fischer

- 07.09.1999** *Hierarchische hybride Monte-Carlo-Methoden für Biomoleküle*
DMV Jahrestagung, Mainz
- 12.11.1999** *Hybride Monte-Carlo-Methoden für Biomoleküle*
Universität Düsseldorf

Karin Gatermann

- 26.03.99** *Applications of Algorithmic Invariant Theory*
Kolloquium des Fachbereichs Mathematik und Statistik der Universität Kent
in Canterbury, England
- 07.05.99** *Equivariant dynamics and invariant theory*
workshop *Cathode II*, 3.5-7.5.1999 am CIRM, Luminy, Frankreich
- 31.05.99** *Algorithmische Invariantentheorie in der Dynamik*
Kolloquium am Fachbereich Mathematik der Universität Dortmund

- 01.06.99** *Dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie*
Oberseminar Reelle und algebraische Geometrie am Fachbereich Mathematik der Universität Dortmund
- 18.06.99** *A class of sparse polynomial systems*
Universität Kent in Canterbury, England
- 21.07.99** *Positive steady states of chemical reaction systems*
Workshop *Computational Dynamics* innerhalb der Konferenz Foundations of Computational Mathematics, Oxford (England), 1999
- 24.07.99** *Algorithmic invariant theory in equivariant dynamics*
Workshop *Symbolic Algebra and Analysis* innerhalb der Konferenz Foundations of Computational Mathematics, Oxford (England), 1999
- 06.08.99** *Algorithmic invariant theory and dynamics*
Minisymposium Computer Algebra Tools innerhalb von EQUADIFF '99 Berlin, 01.–07.08.1999
- 10.12.99** *Graphen und dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie*
Fachbereich Mathematik der Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt am Main

Martin Grötschel

- 26.01.1999** *Mathematische Optimierung und Telekommunikation*
telekom austria, Wien, Österreich
- 29.01.1999** *Die aktuelle Situation des KOBV*
Regionales Arbeitstreffen der KOBV-Arbeitsgruppen, Berlin
- 01.03.1999** *Organizing Large Mathematical Conferences: Pleasure or Nightmare?*
Institute of Mathematics, Beijing University, Beijing, China
- 03.03.1999** *Stable Sets, Set Partitioning, and Applications*
Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China
- 18.03.1999** *The Future of Scholarly Publication and Communication*
Tagung „Academic Computing“, Middle East Technical University, Ankara, Türkei
- 19.03.1999** *Online Optimization of Transportation Systems*
Bilkent University, Ankara, Türkei
- 23.03.1999** *MathNet: Info Global*
Workshop der IuK-Initiative: „IuK99 – Dynamic Documents“, Jena
- 29.03.1999** *On-Line Optimierung in Theorie und Praxis*
ADIMMO-Workshop an der FU Berlin

- 31.03.1999** *Neueste Entwicklungen der Informations- und Kommunikationstechnik: Auswirkungen und Perspektiven für die Wissenschaft*
Adolf-Martens Kolloquium der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Berlin
- 30.04.1999** *Transport und Verkehr: Was kann man verbessern?*
Forschungspolitischer Dialog zum Thema: „Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie“, Berlin
- 06.05.1999** *The Future of Scholarly Publication and Communication*
Instituto de Estudos Avançados, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasilien
- 07.05.1999** *Applications of Combinatorial Online Optimization*
Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasilien
- 11.05.1999** *Mathematical Information: What are the Perspectives for the Future?*
Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, Brasilien
- 12.05.1999** *The Polyhedral Approach to Combinatorial Optimization*
International Conference on „Frontiers of Mathematics“, Rio de Janeiro, Brasilien
- 15.06.1999** *Online Scheduling in Practice*
MAPSP'99 Conference, Renesse, Niederlande
- 01.07.1999** *Nichtlineare Aspekte der ganzzahligen Optimierung*
Institut für Mathematische Optimierung (IMO) der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
- 02.07.1999** *Laudatio auf Herrn Prof. Karl-Heinz Hoffmann*
Festveranstaltung anlässlich des 60. Geburtstages von Karl-Heinz Hoffmann in München
- 07.09.1999** *MathNet global*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), Mainz
- 16.09.1999** *Mathematische Optimierungsmodelle für die Netzplanung bei der telekom austria*
telekom austria, Wien, Österreich
- 26.10.1999** *Mathematische Modelle praktischer OR-Probleme: Was nützen sie?*
Tagung „Operations Research, quo vadis?“, Universität St. Gallen, Schweiz
- 05.11.1999** *Perspektiven und Potentiale des KOBV*
Eröffnungsveranstaltung des KOBV, Berlin
- 29.11.1999** *Der Kooperative Bibliotheksverbund öffnet sich seinen Nutzern*
Workshop: „Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Bibliotheken und Benutzer“, Staatsbibliothek zu Berlin

02.12.1999 *MathNet: A Model for the Future Role of the Mathematical Community in Information and Communication?*

Workshop: „The Future of Mathematical Communication“, MSRI, Berkeley, USA

Christoph Helmberg

08.01.1999 *Solving Semidefinite Relaxations with the Spectral Bundle Method*
DIMACS Workshop on Semidefinite Programming and Large Scale Discrete Optimization, Princeton, USA

02.05.1999 *The Spectral Bundle Method with Sign Constraints*
INFORMS Cincinnati, Spring 1999, Cincinnati, USA

02.05.1999 *Tutorial “Semidefinite Programming for Combinatorial Optimization”*
INFORMS Cincinnati, Spring 1999, Cincinnati, USA

14.05.1999 *A Cutting Plane Algorithm Based on the Spectral Bundle Method*
Joint SIAM Conference on Optimization and SIAM Annual Meeting, Atlanta, USA

11.06.1999 *The m-Cost ATSP*
Integer Programming and Combinatorial Optimization '99, Graz, Österreich

17.06.1999 *Cutting Plane Methods in Semidefinite Programming*
4th International Conference on High Performance Optimization Techniques, Rotterdam, Niederlande

24.07.1999 *Inexact Evaluation and Bounds in the Spectral Bundle Method*
Foundations of Computational Mathematics, Oxford, Großbritannien

03.09.1999 *Scheduling Nonidentical Machines with Sequence Dependent Setup Times*
Symposium on Operations Research 1999, Magdeburg.

06.09.1999 *Inexact Evaluation and Bounds in the Spectral Bundle Method*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), Mainz

29.11.1999 *Das Spektrale Bündel-Verfahren mit Anwendungen in der Kombinatorik*
Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen

Wilhelm Huisinga

26.07.1999 *From Markov Theory to Numerical Approximation of Molecular Conformations*
AP99, Universität Ulm

02.08.1999 *Nearly Uncoupled Markov Chains for Modelling Metastability of Biomolecular Conformations*
EquaDiff, Freie Universität Berlin

20.10.1999 *Conformational Dynamics and Langevin Models*
Universität Augsburg

12.11.1999 *Anwendungsfelder von Eigenwert-Cluster-Problemen*
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Thorsten Koch

19.02.1999 *Planungen zum Aufbau eines Gigabit-Wissenschaftsnetzes in Deutschland*
Workshop DFN-Verein, Berlin

09.03.1999 *Solving Steiner Tree Problems in Graphs to Optimality*
Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

Arie M.C.A. Koster

28.05.1999 *Solving Frequency Assignment Problems via Tree-Decomposition*
6th Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization, Universität Twente, Enschede, Niederlande

19.06.1999 *Optimal Solutions for Frequency Assignment Problems via Tree-Decomposition*
25th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science (WG'99), Ascona, Schweiz

12.10.1999 *Frequency Assignment—Models and Algorithms*
Technische Universität Eindhoven, Eindhoven, Niederlande

Sven O. Krumke

15.03.1999 *Competitive Scheduling of Elevators*
Workshop „Kombinatorische Online-Optimierung: Theorie und Praxis“ im Rahmen des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, ZIB, Berlin

21.03.1999 *Online and Offline Algorithms for Transportation Problems*
Gastvortrag Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA

17.06.1999 *Euler is Standing in Line: Dial-a-Ride Problems with FIFO-Constraints*
25th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Ascona, Schweiz

22.06.1999 *Online Dial-A-Ride Problems*

Dagstuhl-Seminar „Competitive Algorithms“, International Conference and Research Center for Computer Science, Schloß Dagstuhl

07.09.1999 *Wo bleibt der Aufzug? Diskrete Mathematik spart Zeit und Nerven*
(mit Jörg Rambau) Jahrestagung der Deutschen Mathematiker Vereinigung (DMV), Mainz

01.10.1999 *Online Dial-A-Ride Probleme: Jenseits kompetitiver Analyse*
Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, Universität Konstanz

12.11.1999 *Scheduling of Elevators: Online and Offline Algorithms*
Workshop „Verkehrsoptimierung“, Oberwolfach

Monika Kuberek

29.01.99 *AG Normdatenserver und Teilnahme an den Normdateien.*
Vortrag beim Regionalen Treffen der KOBV-Arbeitsgruppen am ZIB

19.04.99 *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg.*
Vortrag beim Treffen der deutschsprachigen Aleph-Anwendergruppe in der Vorarlberger Landesbibliothek, Bregenz

26.05.99 *Der KOBV - Ein innovatives Verbundkonzept für die Region.*
Vortrag auf dem 89. Deutschen Bibliothekartag 25.-29. Mai 1999, Freiburg (Breisgau) in der Vortragsreihe zum Themenkreis XI: “Neue Entwicklungen in den Verbund- und Lokalsystemen”.

19.06.99 *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Der neue, dezentrale Bibliotheksverbund.*
Vortrag in der Bibliothek des Wissenschaftszentrums für Sozialforschung in Berlin Berlin

08.10.99 *Das KOBV-Projekt.*
Vortrag beim Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation, 06.-08.10.1999 im ZIB, Berlin

17.11.99 *Der Kooperative Bibliotheksverbund.*
Vortrag auf der Jahrestagung des Deutschen Bibliotheksverbandes e.V., Landesgruppe Brandenburg, Potsdam

18.11.99 *Einführung in den KOBV - ein innovatives Verbundkonzept.*
Vortrag in der Veranstaltung “Der KOBV - eine neue Entwicklung in der Verbundlandschaft” der VdDB-Landesgruppe Brandenburg, Arbeitskreis Information/Dokumentation, Potsdam

29.11.99 *Der KOBV eröffnet neue Wege für den Bibliotheksverbund.*
Vortrag in der Veranstaltung “Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Benutzer und Bibliotheken” in der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Berlin

Jens Lang

- 13.04.99** *Adaptive Simulation of Wave-like Solutions Arising in Reaction-Diffusion Systems*
The 1999 IMACS International Conference on Nonlinear Evolution Equations and Wave Phenomena, Athens, U.S.A.
- 26.05.99** KARDOS – *ein adaptives Finite-Elemente-Programm für die Lösung von nichtlinearen Evolutionsproblemen*
Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems, Freiburg
- 16.06.99** *Theorie und Praxis von Linear-Impliziten Methoden für die zuverlässige Lösung von parabolischen Differentialgleichungssystemen*
Institut für Mathematik, Universität Augsburg
- 09.07.99** *Adaptive Multilevel Finite Elemente in Technologie und Medizin*
Institut für Mathematik, Universität Hannover
- 26.07.99** *Adaptive Multilevel Solutions of Nonlinear Parabolic PDE Systems*
The Third European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, Jyväskylä, Finland
- 14.09.99** *Theorie und Praxis von Linear-Impliziten Methoden für die zuverlässige Lösung von parabolischen Differentialgleichungssystemen*
Institut für Mathematik, Universität Clausthal-Zellerfeld
- 15.10.99** *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems*
Simon Fraser University Vancouver, Institute of Mathematics and Statistics, British Columbia, Canada
- 17.11.99** *Theorie und Praxis von Adaptiven Multilevel Finiten Elementen*
Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen
- 15.12.99** *Adaptive Multilevel Finite Elemente in Technologie und Medizin*
Mathematisches Institut, Universität Leipzig
- 21.09.–13.11.99**
Aufenthalt an der Simon Fraser University Vancouver, Institute of Mathematics and Statistics, British Columbia, Canada, (R.D. Russell)

Andreas Löbel

- 17.11.1999** *Zielorientierte Dienstplanoptimierung im ÖPNV*
Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- 18.11.1999** *Zielorientierte Dienstplanoptimierung im ÖPNV*
18. Symposium des Arbeitskreises „Mathematik in Forschung und Praxis: Modellierung und Simulation von Verkehr“, Bad Honnef

Stefan Lohrum

- 29.01.99** *AG Errichtung der KOBV-Suchmaschine im Zusammenspiel der Lokalsysteme mit der Suchmaschine.*
Vortrag gemeinsam mit J. Willenborg beim regionalen Treffen der KOBV-Arbeitsgruppen am ZIB
- 10.06.99** *Integration von SISIS-Bibliotheken in den KOBV - Erste Schritte.*
11. Tagung des SISIS-Anwenderforums Berlin-Brandenburg,
Fachhochschule für Verwaltung und Rechtspflege Berlin, Berlin
- 05.10.99** *KOBV Search Engine - Progress Report.*
10. ICAU Annual Meeting, 04.-06. Oktober 1999, Siena
- 18.11.99** *Die KOBV-Suchmaschine - technische Grundlagen.*
Vortrag in der Veranstaltung "Der KOBV - eine neue Entwicklung in der Verbundlandschaft" der VdDB Landesgruppe Brandenburg, Arbeitskreis Information/Dokumentation, Potsdam
- 29.11.99** *Die KOBV-Suchmaschine - Technische Aspekte.*
Vortrag in der Veranstaltung des ZIB "Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Benutzer und Bibliotheken" in der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Berlin

Joachim Lügger

- 29.01.99** *Die KOBV-Suchmaschine im Vergleich mit Internet-Suchmaschinen.*
Vortrag beim regionalen Treffen der KOBV-Arbeitsgruppen am ZIB, Berlin
- 22.06.99** *Aktivitäten des ZIB im Bereich der wissenschaftlichen Information und Kommunikation.*
Besuch von Studenten der Universität Siegen im ZIB, Berlin
- 20.09.99** *Probleme und Chancen des Publikationswesens im Zeitalter der elektronischen Vernetzung.*
Vortrag zum Fachgespräch "Bibliothekskrise", BayernSPD, Landtagsfraktion, Arbeitskreis Hochschule, Forschung und Kultur, München
- 06.10.99** *Initiativen des Konrad-Zuse-Zentrums im Bereich der wissenschaftlichen Information und Kommunikation.*
Vortrag beim Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation,
6.-8.10.1999 im ZIB, Berlin
- 04.11.99** *Über Suchmaschinen, Verbünde und die Integration von Informationsangeboten - mit einem Vorschlag zur Realisierung einer digitalen Fachbibliothek Mathematik.*
Vortrag zum Treffen des DFG-Unterausschusses für Datenverarbeitung und Kommunikationstechniken im ZIB, Berlin

- 06.11.99** *On Search Engines, Library Consortia and the Integration of Information Offers.*
Vortrag beim Treffen der KOBV- und Ex Libris Entwicklungsgruppen vom 07.-08. November 1999, Jerusalem
- 18.11.99** *Konzepte der KOBV-Suchmaschine.*
Vortrag zum 1. Treffen der Arbeitsgruppe Virtuelle Fachbibliotheken in der Staats- und Universitätsbibliothek der Universität Göttingen, Göttingen
- 29.11.99** *Über Suchmaschinen und deren Anwendung im Wissenschaftsbereich.*
Vortrag in der Veranstaltung des ZIB "Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Benutzer und Bibliotheken" in der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Berlin

Frank Lutz

- 12.04.1999** *Simplicial and Combinatorial Manifolds*
Workshop „Geometric and Topological Combinatorics“, Oberwolfach
- 26.04.1999** *Simpliziale und kombinatorische Mannigfaltigkeiten*
Institut für Geometrie, Technische Universität Dresden

Alexander Martin

- 07.01.99** *Ganzzahlige Programme mit Blockstruktur*
Technische Universität Darmstadt
- 11.03.99** *Integer Programs with Block Structure*
Workshop „Combinatorial Optimization“, Aussois, Frankreich
- 12.07.99** *Numerische Aspekte der Ganzzahligen Linearen Programmierung*
Universität Bayreuth
- 07.09.99** *Integer Programs with Block Structure*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker Vereinigung (DMV), Mainz
- 15.09.99** *Ganzzahlige Programme mit Blockstruktur*
Universität Bonn
- 19.10.99** *Ganzzahlige Programme mit Blockstruktur*
Universität Trier
- 20.10.99** *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*
Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- 07.11.99** *Mixed Integer Programming, Part I*
Workshop „Verkehrsoptimierung“, Oberwolfach

André Merzky

- 17.09.1999** *Transatlantisches Metacomputing unter Einsatz von Cray-Supercomputern*
Cray- und SGI- Arbeitskreises IGC (zusammen mit H. Busch)
- 30.09.1999** *Visuelle Kontrolle und Steuerung von verteilten Anwendungen auf Höchstleistungsrechnern*
HLRN-Workshop: "Wissenschaftliche Anwendungen auf Höchstleistungsrechnern", Hannover, HLRN
- 17.12.1999** *Efficient Distributed File I/O for Visualization in Grid Environments*
PDC Annual Conference on Simulation and Visualization on the Grid, Dec. 15-17, 1999 Stockholm, Sweden

Michael Meyer

- 15.10.1999** *Virtual Screening und de novo Wirkstoff Design*
AnalytiCon AG, Potsdam
- 24.11.1999** *Molecular Modelling Studien zum Design von neuartigen Siderophoren*
Technische Fachhochschule Berlin, 5. Chemie-Kolloquium

Jacek Nadobny

- 19.08.1999** *3D phased array applicator for hyperthermia treatment in pelvis*
XXVI th General Assembly of International Union of Radio Science (URSI), August, 13-21, 1999, Toronto, Ontario, Canada

Peter Nettesheim

- 26.05.1999** *Numerical Integrators for Enhanced Quantum-Classical Models*
Workshop "Scientific Computing in Chemical Engineering II", TU Hamburg-Harburg
- 03.08.1999** *Enhanced Quantum-Classical Molecular Dynamics: Models and Numerical Integrators*
EquaDiff, Freie Universität Berlin
- 11.11.1999** *Mittelnde Integratoren für fast-adiabatische Dynamik*
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf
- 13.12.1999** *Mittelnde Integratoren für fast-adiabatische Dynamik*
Technische Universität München

Olaf Paetsch**10.12.1999** *Der Multimedia-Standard MPEG4*

Workshop Digitales Video, WRAKG/ZKI-AK Multimedia und Graphik, Universitätskolleg Bommerholz

Jörg Rambau**15.03.1999** *Online-Planning under Reasonable Load*

Workshop „Kombinatorische Online-Optimierung: Theorie und Praxis“ im Rahmen des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, ZIB, Berlin

16.04.1999 *The Generalized Baues Problem for Cyclic Polytopes*

Workshop „Geometric and Topological Combinatorics“, Oberwolfach

19.05.1999 *Echtzeitoptimierung komplexer Transportsysteme*

Berichts- und Antragskolloquium des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, Bad Honnef

07.09.1999 *Wo bleibt der Aufzug? Diskrete Mathematik spart Zeit und Nerven*

(mit Sven O. Krumke) Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), Mainz

09.11.1999 *Online-Planning under Reasonable Load*

Workshop „Verkehrsoptimierung“, Oberwolfach

Detlef Reichardt**08.02.1999** *Ab initio density functional molecular dynamics with Gaussian basis; Investigation of structural and dynamical properties of small metallic clusters*

Molecular Dynamics on Parallel Computers, Workshop Forschungszentrum Jülich (Posterbeitrag, zusammen mit V. Bonačić-Koutecký, P. Fantucci), 08.–10. Februar 1999

15.12.1999 *Projekt META – Verteiltes Supercomputing mit GAMESS-UK*

GTB-Anwendertreffen, ZIB

Alexander Reinefeld**19.02.1999** *RSD: Resource and Service Description for Distributed High-Performance Computing*

Informatik Kolloquium, Freie Universität Berlin

11.03.1999 *COTS Integration: Plug and Pray? On the Risks of Using Common Off-The-Shelf Technology*

Albert-Einstein-Institut Potsdam

- 26.05.1999** *A Resource Description Environment for Distributed Computing Systems*
2. Metacomputing Workshop Stuttgart
- 20.09.1999** *Metacomputing: Theorie und Praxis (eingeladener Hauptvortrag)*
Symposium on Metacomputing and Distributed Computing, Forschungszentrum Jülich
- 26.11.1999** *Metacomputing in Chemistry and Bioinformatics (eingeladener Hauptvortrag)*
METACHEM Management Workshop, EU, Brüssel (zusammen mit T. Steinke)

Beate Rusch

- 28.01.99** *Präsentation des ALEPH500-Bibliothekssystems.*
Vortrag und Präsentation im Rahmen der 9. Arbeitsberatung des KOBV-Steuerungsgremiums im ZIB, Berlin
- 29.01.99** *AG Fremddatenangebot und Fremddatenserver.*
Vortrag mit anschließender Software-Präsentation im Rahmen des Regionalen Arbeitsgruppentreffens der KOBV-Arbeitsgruppen am ZIB, Berlin
- 27.04.99** *Ein neuer regionaler Bibliotheksverbund: Der KOBV*
Vortrag mit anschließender Präsentation zum Besuch einer Studiengruppe aus der Wirtschaftswissenschaftlichen Dokumentation der TU Berlin am ZIB, Berlin
- 15.10.99** *Die KOBV-Suchmaschine.*
Vortrag mit anschließender Präsentation im Rahmen der Veranstaltung "Bibliothekarische Informations- und Dienstleistungsangebote im Internet", in der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Berlin
- 20.10.99** *Die KOBV-Suchmaschine.*
Präsentation im Anschluß an die 13. Arbeitsberatung des KOBV-Steuerungsgremiums im ZIB, Berlin
- 04.11.99** *Die KOBV-Suchmaschine.*
Präsentation zum Treffen des DFG-Unterausschusses für Datenverarbeitung und Kommunikationstechniken im ZIB, Berlin
- 18.11.99** *Die KOBV-Suchmaschine.*
Softwarepräsentation im Rahmen der Veranstaltung "Der KOBV - eine neue Entwicklung in der Verbundlandschaft" der VdDB-Landesgruppe Brandenburg, Arbeitskreis Information/Dokumentation, Potsdam
- 29.11.99** *Einsatz der KOBV-Suchmaschine für Benutzer und ihre Bibliotheken.*
Vortrag mit anschließender Software-Präsentation im Rahmen der Veranstaltung "Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein

neuer Start für Benutzer und Bibliotheken in der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz, Berlin

Frank Schmidt

- 13.05.99** *Discrete transparent boundary conditions for Helmholtz's equation.*
International Conference on Theoretical and Computational Acoustics,
Trieste, Italy
- 12.07.99** *Eine Methode zur Konstruktion von diskreten transparenten Randbedingungen.*
Oberseminar Numerische Mathematik, TU München
- 28.08.–28.09.99** *Aufenthalt im Department of Physics, University of Waterloo, Canada*
- 13.09.99** *Group velocity analysis of numerical integrators for Schrödinger's equation.*
Department of Physics, University of Waterloo, Canada
- 14.09.99** *Discrete transparent boundary conditions for Wide-Angle One-Way Helmholtz equations.*
Department of Physics, University of Waterloo, Canada

Johannes Schmidt-Ehrenberg

- 09.07.1999** *Wissenschaftliche Visualisierung: Ziele, Methoden und Resultate*
Informatik-Kolloquium, Freie Universität Berlin (zusammen mit Hans-Christian Hege)
- 23.11.1999** *Von atomaren zu kosmischen Dimensionen - Einblicke in die Natur durch wissenschaftliche Visualisierung*
SiemensForum Berlin (zusammen mit Hans-Christian Hege)

Christof Schütte

- 10.02.99** *On Dynamical Transitions between Conformational Ensembles*
Workshop "Molecular Dynamics on Parallel Computers", Jülich
- 04.03.99** *The thin red line between complexity reduction and oversimplification in biomolecular modelling*
Workshop "BioInformatics", Berlin
- 09.03.99** *Konformationsdynamik von Biomolekülen: Kopplung von Simulation und Analyse*
Humboldt-Universität zu Berlin
- 22.04.99** *Metastabilität und geometrische Flexibilität von molekularen Konfor-*

mationen

LMU München

- 30.04.99** *Mathematische Innovation beim Entwurf hochspezifischer Biomoleküle*
Forschungspolitischer Dialog “Angewandte Mathematik: die verborgene Schlüsseltechnologie”, Berlin (Zusammen mit F. Cordes)
- 26.05.99** *Nonadiabatic Effects in Quantum-Classical Molecular Dynamics*
Scientific Computing in Chemical Engineering II, TU Hamburg–Harburg
- 06.08.99** *Conformational Dynamics: Almost Invariant Structures in Molecular Motion*
EquaDiff '99, Berlin
- 09.08.99** *Computational Conformation Dynamics: On Transfer Operators in Molecular Dynamics*
Kolloquium des DFG-Schwerpunktes “DANSE”, Berlin
- 06.09.99** *Konformationsdynamik beim Entwurf hochspezifischer Biomoleküle*
DMV-Jahrestagung, Mainz
- 19.-21.10.99** *Conformational Dynamics: Modelling, Theory, Algorithm, and Application to Biomolecules*
Vortragsreihe an der Universität Augsburg

Wolfram Sperber

- 05.12.1999** *The Idea of Secondary Homepages in MathNet*
Vortrag auf CEIC-Meeting der IMU, MSRI, Berkeley, USA

Detlev Stalling

- 05.03.1999** *Mehrschichtige Oberflächenmodelle zur computergestützten Planung in der Chirurgie*
Workshop Bildverarbeitung für die Medizin 1999, Heidelberg
- 17.04.1999** *Erzeugung von Polygon-Modellen aus medizinischen Bilddaten in einer verteilten Arbeitsumgebung*
7. Internationales Münchener Symposium für Mund-, Kiefer-, und Gesichtschirurgie
- 02.06.1999** *Fast Texture-Based Algorithms for Vector Field Visualization*
Senatssaal der Humboldt Universität Berlin, anlässlich der Verleihung des Carl-Ramsauer-Preies 1999
- 27.08.1999** *Aspects of Scientific Visualization - Tools and Algorithms*
Paul-Scherrer-Institut, Villingen, Schweiz
- 18.11.1999** *3D-Strömungsvisualisierung mit dem Programmsystem Amira*
4. Fachtagung Grundwassermodellierung, Ruhr-Universität Bochum

Marc Steinbach

- 03.03.1999** *Rekursion und sukzessive Verfeinerung für Innere-Punkt-Methoden auf Szenariobäumen*
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin
- 22.03.1999** *(Numerical) Surprises in Multi-Period Risk Management*
International Conference on Optimization, Trier
- 03.05.1999** *Variations on Markowitz: Approximating Multi-Period Downside Risk*
Universität St. Gallen, Schweiz
- 10.05.1999** *Exploiting Global and Local Sparsity in Multistage Stochastic Programs*
6th SIAM Conference on Optimization, Atlanta, USA
- 19.05.1999** *Mehrstufige stochastische Optimierungsalgorithmen zur Prozeßregelung*
Berichts- und Antragskolloquium des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, Bad Honnef
- 14.07.1999** *Überraschungen im mehrperiodischen Markowitz-Modell*
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin
- 20.10.1999** *Optimale Kapitalentnahme im mehrperiodischen Markowitz-Modell*
Gerhard-Mercator-Universität Duisburg
- 25.11.1999** *Ein stochastischer Optimierungsansatz zur robusten modellgestützten Regelung*
Workshop „Moving Horizon“ im Rahmen des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“, Rolduc, Niederlande

Thomas Steinke

- 13.04.1999** *Distributed Applications in Molecular Simulations*
Besuch der Studentenvereinigung „A-Eskwadraat“, Utrecht, NL
- 25.05.1999** *Density functional study of guanine and uracil quartet structures*
13. Molecular Modelling Workshop, Darmstadt (Posterbeitrag, zusammen mit M. Meyer, M. Brandl, J. Sühnel)
- 22.07.1999** *Warum benötigt der Forscher in der Chemie Höchstleistungsrechner?*
Besuch von Studenten der Universität Siegen
- 26.11.1999** *Metacomputing in Chemistry and Bioinformatics*
METACHEM Management Workshop, EU, Brüssel (zusammen mit A. Reinefeld)

Hinnerk Stüben

22.06.99 *Improvement of Tunneling of the Topological Charge in Tempered Simulations of Full QCD*

John von Neumann Institut für Computing, Jülich

29.06.99 *Decorrelation of the Topological Charge in Tempered Hybrid Monte Carlo Simulations of QCD*

The XVII International Symposium on Lattice Field Theory, Lattice '99, June 29 – July 03, 1999, Pisa, Italy

09.10.99 *Decorrelation of the Topological Charge in Tempered Simulations of Full QCD*

NATO Advanced Research Workshop “Lattice Fermions and Structure of the Vacuum”, October 05–09, 1999, Dubna, Russia

16.10.99 *Lattice Gauge Theory on the Supercomputers at ZIB*

DESY Zeuthen

Martin Weiser

29.06.99 *Inexakte Newtonverfahren für nichtlineare elliptische Probleme*

Institut für Mathematik / Karl-Franzens-Universität Graz

Roland Wessäly

27.05.1999 *Mathematische Optimierung von ausfallsicheren Telekommunikationsnetzen*

13. DFN Arbeitstagung, Düsseldorf

28.05.1999 *DISCNET: Von mathematischen Modellen, über Algorithmen zum Transportnetzoptimierungstool*

E-Plus, Düsseldorf

28.05.1999 *Erste Studie des ZIB zur Standortplanung bei E-Plus*

E-Plus, Düsseldorf

21.06.1999 *Optimierung des DFN-Netzes*

telekom austria, Wien, Österreich

16.09.1999 *Analyse des Netzplanungsprozesses bei der TELEKOM AUSTRIA*

telekom austria, Wien, Österreich

09.11.1999 *Capacitated survivable network design*

INFORMS Fall 1999 Meeting, Philadelphia, USA

Josef Willenborg

29.01.99 *AG Errichtung der KOBV-Suchmaschine im Zusammenspiel der Lokalsysteme mit der Suchmaschine.*

Vortrag gemeinsam mit Stefan Lohrum beim regionalen Treffen der KOBV-Arbeitsgruppen am ZIB, Berlin

Stefan Zachow

24.06.1999 *Optimized Arrangement of Osseointegrated Implants: A Surgical Planning System for the Fixation of Facial Protheses*

Computer Assisted Radiology and Surgery CARS 1999, Paris

12.07.1999 *Optimale Platzierung knochenverankerter Implantate zur Fixierung von Epithesen: Ein 3D Planungssystem für den Einsatz in der chirurgischen Epithetik*

Institut für Medizinische Physik (IMP), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Malte Zöckler

17.04.1999 *Erzeugung von Polygon-Modellen aus medizinischen Bilddaten in einer verteilten Arbeitsumgebung (zusammen mit Detlev Stalling und Hans-Christian Hege; mit Online-Demonstration per Video-Konferenz von Berlin aus)*

7. Int. Münchener Symposium für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie

11.11.1999 *Virtuelles Neuranatomie Labor*

BMBF Status-Seminar „Standardgehirn“ an der Universität Würzburg.

30.11.1999 *Geometrie-Rekonstruktion mittels Stereo-Endoskopie*

Hals-, Nasen- und Ohrenklinik der Julius-Maximilians-Universität Würzburg (zusammen mit Hans-Christian Hege)

Lin Zschiedrich

08.09.99 *Dispersion und klassischer Grenzfall von Integratoren für die zeitabhängige Schrödingergleichung.*

Studierenden-Konferenz Mathematik der Deutschen Mathematiker Vereinigung, Johannes Gutenberg Universität Mainz.

11.11.99 *Dispersion und klassischer Grenzfall von Integratoren für die zeitabhängige Schrödingergleichung.*

Doktorandenseminar der FU Berlin

7.2 Vorlesungen und Seminare

Wolfgang Baumann: TU Berlin

WS 98/99 *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, mit F. Thiele)

14.-16.04.1999 *Einführung in die parallele Programmierung unter Verwendung von MPI* (Christian-Albrechts-Universität Kiel, Veranstalter: Wolfgang Baumann und Hinnerk Stüben)

Manfred Brandt: Humboldt–Universität zu Berlin

SS 99 *Funktionentheorie* (Vorlesung/Übung)

Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 98/99 *Numerik partieller Differentialgleichungen* (Vorlesung)

WS 98/99, SS 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)

WS 99/2000 *Numerik partieller Differentialgleichungen, Numerik II* (Vorlesung)

WS 99/2000 *Neuronale Netze* (Seminar) *Hauptveranstalter:* R. Rojas

WS 99/2000 *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)

WS 99/2000 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden* (*Mitveranstalter:* R. Kornhuber)

Karin Gatermann: FU Berlin

WS 98/99 *Gleichgewicht und Dynamik in chemischen Reaktionen* (Seminar)

SS 99 *Algorithmische Singularitätentheorie* (Vorlesung/Übung)

WS 99/00 *Verzweigungstheorie* (Vorlesung/Übung)

Martin Grötschel: Technische Universität Berlin

SS 99 *Matroidtheorie* (Vorlesung)

WS 99/00 *Ausgewählte Kapitel aus der Ganzzahligen Optimierung* (Vorlesung)

WS 99/00 *Ganzzahlige Optimierung* (Seminar)

Christoph Helmberg: Freie Universität Berlin

SS 99 *Konvexe Minimierung* (Vorlesung)

Arie M. C. A. Koster: Universiteit Maastricht (Niederlande)

WS 99/00 *Introduction in programming C++* (Vorlesung/Übung)

WS 99/00 *Werkcollege Logistiek* (Seminar)

Sven O. Krumke: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Ausgewählte Kapitel aus der ganzzahligen Optimierung* (Blockvorlesung; in Zusammenarbeit mit Martin Grötschel und Jörg Rambau)

Jens Lang: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Numerik für Informatiker* (Vorlesung)

Frank Lutz: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Höhere Mathematik I für Elektrotechniker* (Übung/Tutorium)

Alexander Martin: Technische Universität Berlin

SS 99 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen* (Vorlesung)

Jörg Rambau: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Ausgewählte Kapitel aus der ganzzahligen Optimierung* (Blockvorlesung; in Zusammenarbeit mit Martin Grötschel und Sven O. Krumke)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

SS 99 *Architektur paralleler Höchstleistungsrechner* (Vorlesung/Übungen) *Mitveranstalter: J. Simon*

WS 99/00 *System Area Networks* (Seminar) *Mitveranstalter: E. Fehr (FU), J. Simon (ZIB)*

Burkhard Schmidt: FU Berlin

1999 *Moleküle im Rechner* (Oberseminar) FB Chemie zusammen mit Christof Schütte, FB Mathematik und Informatik der FU Berlin

Frank Schmidt: TU Berlin

WS 99/00 *Numerik für Informatiker (gemeinsam mit J. Lang)* (Vorlesung/Übung)

Frank Schmidt: FU Berlin

WS 99/00 *Mathematische Software-Werkzeuge zur Lösung von Problemen aus Naturwissenschaft und Technik* (Vorlesung)

Christof Schütte: FU Berlin

1999 *Moleküle im Rechner* (Oberseminar) FB Mathematik und Informatik zusammen mit Burkhard Schmidt, FB Chemie der FU Berlin

Marc Steinbach: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Dynamische Optimierung* (Vorlesung)

Stefan Zachow: Technische Universität Berlin

WS 99/00 *Computergrafik und VR in der Medizin* (Projektseminar; in Zusammenarbeit mit René Tschirley (TU-Berlin))

Tagungen und Gäste des ZIB

8.1 Gastvorträge am ZIB

- 08.01.1999** Ravindran Kannan (Yale University, USA):
Clustering in Large Graphs and Matrices
- 27.01.1999** A. Nolte (Yale University, USA):
Local Search in Smooth Convex Sets
- 05.03.1999** Hugues Marchand (London School of Economics, U.K.):
Building Superadditive Functions to Generate Valid Inequalities for Mixed Integer Sets
- 10.03.1999** Andreas Erdmann (ZPR, Köln):
Ein Branch&Price-Verfahren für das Crew Scheduling Problem bei Fluggesellschaften
- 08.04.1999** Thomas Epping (Universität Bochum):
Näherungsverfahren für das Problem des Handlungsreisenden
- 19.04.1999** Dr. Pavel Jungwirth (Akademie der Wissenschaften, Prag, Tschechien):
Quantum dynamics of large polyatomics: From bad to better if not good
- 22.04.1999** László Szegő (Eötvös Lorand University, Budapest, Ungarn):
Path-Matchings, Disjoint Branchings
- 30.04.1999** Prof. Dr. Roland Felix (Virchow Klinikum, Strahlenklinik und Poliklinik, Humboldt-Universität zu Berlin):
Wärme für das Leben: therapeutischer Gewinn durch Hyperthermie heute und zukünftiges Potential
- 30.04.1999** Prof. Dr. Hans Föllmer (Humboldt-Universität zu Berlin):
Risiken auf den Finanz- und Versicherungsmärkten – ein Thema der Mathematik?
- 30.04.1999** Prof. Dr. Herbert Gajewski (WIAS Berlin):
Simulation und Entwicklung elektronischer Bauelemente
- 30.04.1999** Dr. Bernd Heinemann (Institut für Halbleiterphysik, Frankfurt/Oder):

Optimierung schneller Transistoren

- 30.04.1999** Dr. Christoph März (Bankgesellschaft Berlin AG):
Was macht ein Quant im Investment Banking?
- 30.04.1999** Dr. Wolfgang Pfau (alpha microelectronics GmbH, Frankfurt/Oder):
Design von Schaltkreisen der Leistungselektronik
- 30.04.1999** Prof. Dr. Axel Reich (Kölnische Rückversicherung, Köln):
Risikoselektion in der Versicherungswirtschaft
- 30.04.1999** Prof. Dr. Jürgen Sprekels (WIAS Berlin):
Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie
- 30.04.1999** Gerhard Stahl (Bundesaufsichtsamt für das Kreditwesen, Berlin):
Warum benötigt ein Risikomanager den Satz des Pythagoras?
- 30.04.1999** Dipl.-Math. Uwe Strubbe (Gesellschaft für Informatik, Verkehrs- und Umweltplanung, Berlin):
Endlich nicht mehr warten: ÖPNV-Planungssysteme
- 14.05.1999** Andre Rohe (Universität Bonn):
Computing Minimum-Weight Perfect Matchings
- 07.06.1999** Adrian Zymolka (Philipps-Universität Marburg):
Untersuchung eines Tourenplanungsproblems
- 07.06.1999** Arie M. C. A. Koster (Universiteit Maastricht, Niederlande):
Frequency Assignment: Exact Solution Methods
- 08.06.1999** Prof. Dr. Alexandre Chorin (University of California at Berkeley, USA):
Optimal prediction
- 11.06.1999** L. Schubert (Fachhochschule Konstanz):
Grundlagen und Risikomaße im Portfoliomanagement
- 18.06.1999** Tuomo Takkula (Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden):
Parallel Integer Optimization for Crew Scheduling
- 18.06.1999** Nicole Kruse (Universität Bremen):
*Differenzgleichungen und diskrete dynamische Systeme
oder
Die andere Seite des Chaos*
- 25.06.1999** Barbara Maren Winkler (TU Berlin):
Kurzfristige Abbauplanung mit linearer Mehrzieloptimierung
- 05.07.1999** Dr. Marius Lewerenz (Forschungszentrum Jülich GmbH):
Quanten Monte Carlo: Techniken, Anwendungen und Perspektiven

- 14.07.1999** Csaba Fabian (Academy of Economic Studies Faculty of Economic Cybernetics, Statistics, and Informatics Bukarest, Rumänien):
Different Crossover Mutations for SMS Problems
- 22.07.1999** Peter Richter (Satellite Communication GmbH, Teltow):
Efficient Embedding of Flow Graphs Considering Flow Intensity Weighted Minimum Trace Cost
- 16.11.1999** László Szegő (Eötvös Lorand University, Budapest, Ungarn):
Can Canonical Structures Help to Find Polynomial Algorithms?
- 17.11.1999** Roberto Cominetti (Universidad de Chile, Santiago, Chile):
Penalty and Descent Methods in Linear Programming
- 13.12.1999** Dipl.–Phys. Mathias Nest (University College, U.K.):
The mapped Fourier method: Combining pseudo-spectral methods with non-equidistant grids
- 14.12.1999** Prof. Dr. Miloslav Feistauer (Charles University, Prag, Tschechien):
Theory and adaptivity in numerical schemes for compressible high-speed flow
- 15.12.1999** Lisa Fleischer (Columbia University, New York, USA):
A Combinatorial, Strongly Polynomial Algorithm for Submodular Function Minimization

8.2 Gastaufenthalte am ZIB

- Susanne Albers** (MPI Saarbrücken, jetzt Universität Dortmund)
14.–20.03.1999
- Andras Aszodi** (Novartis, Wien, Österreich)
02.–05.03.1999
- Henri E. Bal** (Vrije Universiteit, Dept. of Mathematics and Computer Science, Amsterdam, Niederlande)
22.10.1999
- Michiel Blom** (Technische Universiteit Eindhoven, Niederlande)
28.06.–02.07.1999
- Dietrich Braess** (Institut für Mathematik, Universität Bochum)
15.–16.07.1999
- Wolfram Büttner** (Siemens AG, München)
16.–18.05.1999
- Bob Bywater** (Novo Nordisk, Kopenhagen, Dänemark)
03.–04.03.1999

-
- Roberto Cominetti** (Universidad de Chile, Santiago, Chile)
13.–18.11.1999
- Michael Dellnitz** (FB Mathematik und Informatik, Universität Paderborn)
24.02.1999
- Thomas Epping** (Universität Bochum)
08.04.1999
- Andreas Erdmann** (ZPR Köln)
10.03.1999
- Csaba Fabian** (Academy of Economic Studies, Bukarest, Rumänien)
14.–15.07.1999
- Lisa Fleischer** (The Fields Institute, Toronto, Kanada)
12.–19.12.1999
- Clemens Frey** (Universität Bayreuth)
07.06.1999
- Noud Gademann** (Production and Operations Management Group, Faculty of
Mechanical Engineering, University of Twente, Niederlande)
14.–19.03.1999
- Tobias Gayer** (Institut für Mathematik, Universität Augsburg)
06.–08.12.1999
- Birgit Grohe** (Universität Kaiserslautern)
19.01.1999
- Martyn Guest** (Computational Science & Engineering, CLRC Daresbury La-
boratory, UK)
01.–03.11.1999
- Jörg Haber** (Zentrum Mathematik, TU München)
18.03.1999
- Friedrich Hirzebruch** (Max-Planck-Institut für Mathematik, Bonn)
20.–22.05.1999
- Daniel Hempel** (ZIB (damals Universität Hamburg))
15.11.1999
- Karl-Heinz Hoffmann** (Stiftung caesar, Bonn)
21.–22.05.1999
- Ravindran Kannan** (Yale University, USA)
08.–10.01.1999
- Serkan Hosten** (University of California at Berkeley)
27.06.–05.07.1999

- Carl Kesselmann** (USC/Information Sciences Institute, Kalifornien, USA)
09.–12.06.1999
- Arie M.C.A. Koster** (Universiteit Maastricht, Niederlande)
07.06.1999
- Nicole Kruse** (Universität Bremen)
18.06.1999
- Michail V. Kulagin** (Center of Scientific Telecommunications and Information Technologies, Russische Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland)
07.–10.03.1999
- Thomas Liebling** (EPFL, Lausanne)
16.–18.05.1999
- Christian Lubich** (Mathematisches Institut, Universität Tübingen)
15.–17.02.1999
- Hugues Marchand** (London School of Economics, London, U.K.)
05.03.1999
- A. Nolte** (Yale University, USA)
27.01.1999
- Willem de Paepe** (Technische Universiteit Eindhoven, Niederlande)
28.06.–02.07.1999
- Peter Richter** (Satellite Communication GmbH, Teltow)
22.07.1999
- Joachim Römelt** (Bayer AG, Leverkusen)
18.05.1999
- Andre Rohe** (Universität Bonn)
14.05.1999
- Reinhard Schneider** (Lion AG, Heidelberg)
02.–05.03.1999
- L. Schubert** (Fachhochschule Konstanz)
11.06.1999
- Vladimir A. Serebriakov** (Rechenzentrum der Russischen Akademie der Wissenschaften, Moskau, Rußland)
07.–10.03.1999
- Paul Sherwood** (Computational Science & Engineering, CLRC Daresbury Laboratory, UK)
01.–03.11.1999
- Lázló Szegő** (Eötvös Lorand Universität, Budapest, Ungarn)
03.11.–01.12.1999

- Tuomo Takkula** (Chalmers University of Technology, Göteborg, Schweden)
01.06.–31.08.1999
- Willie Taylor** (Medical Research Council, London, UK)
03.–05.03.1999
- Rüdiger Thiele** (Universität Leipzig)
21.05.1999
- Niklas van Ösen** (Universität Hannover)
07.06.1999
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)
17.–18.05.1999
- Thomas Wolf** (Queen Mary and Westfield College, London, U.K., und ZIB Fellow)
12.–16.04.1999 und 06.–10.09.1999
- Don Zagier** (Max-Planck-Institut für Mathematik, Bonn)
21.05.1999
- Adrian Zymolka** (Philipps-Universität Marburg)
07.06.1999

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

- 08.01.1999** 22. Berliner Algorithmen-Tag
Veranstalter: Alexander Martin
- 29.01.1999** Regionales Treffen der KOBV-Arbeitsgruppen
Veranstalter: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch, Josef Willenborg
- 03.–04.03.1999** Distributed Bioinformatics Applications for the Pharmaceutical Industry. Workshop im ZIB
Veranstalter: Alexander Reinefeld
- 15.03.1999** Workshop “Kombinatorische Online-Optimierung: Theorie und Praxis”
Veranstalter: Martin Grötschel, Sven O. Krumke, Jörg Rambau
- 16.03.1999** Besuch im ZIB: Schülerinnen und Schüler der Friedrich-Ebert-Oberschule (Berlin-Wilmersdorf)
- 25.03.1999** Schnelle Netze – ohne Grenzen. Anschluß an das Gigabitnetzwerk Berlin-Brandenburg.
Veranstalter: Hubert Busch, Renate Weidinger

- 12.04.1999** Besuch von Absolventen der Ausbildung zum Systemelektroniker der TU Berlin.
Veranstalter: Hubert Busch, Wolfgang Pyszkalski
- 13.04.99** Besuch im ZIB: Schülerinnen und Schüler der Universität Utrecht (A-Eskwadraat Travel '99), Niederlande
- 30.04.99** 8. Veranstaltungsreihe Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Angewandte Mathematik – die verborgene Schlüsseltechnologie
- 19.–20.05.1999** Power-User und Supercomputer, Workshop im ZIB
Veranstalter: Peter Deuffhard, Rupert Klein, Alexander Reinefeld
- 10.06.99** Besuch im ZIB: Schülerinnen und Schüler des Max-Planck-Gymnasiums (Berlin-Mitte)
- 21.06.1999** Öffentliche Vorträge und Führung “Das Konrad-Zuse-Zentrum Berlin: Denkfabrik für Mathematik und Informationstechnik”. (Im Rahmen „Berlin: Offene Stadt“ zur Themenwoche „Stadt des Wissens“ im ZIB)
Veranstalter: Alexander Reinefeld, Hans-Hermann Frese, Olaf Paetsch, Malte Zöckler, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Werner Benger, Peter Ertmann
- 22.07.1999** Besuch von Studenten der Universität Siegen.
Veranstalter: Hubert Busch, Wilhelm Huisinga, Sven Krumke, Joachim Lügger, Detlef Stalling, Thomas Steinke
- 26.07.1999** Besuch von Studenten der FHTW Berlin.
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 10.11.1999** Besuch des Leistungskurses Mathematik des Schiller-Gymnasiums Berlin.
Veranstalter: Hubert Busch, Wilhelm Huisinga, Frank Cordes, Britta Broser, Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 23.11.1999** Besuch von Studenten der TU Berlin.
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 29.11.1999** Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Benutzer und Bibliotheken. KOBV-Veranstaltung¹ in der Staatsbibliothek zu Berlin – Preußischer Kulturbesitz, Berlin
Veranstalter: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch
- 21.12.1999** Besuch von Studenten der FHTW Berlin.
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz

¹<http://www.kobv.de/events/99nov2/index.html>

8.4 Mitveranstalter von Tagungen

Peter Deuffhard

25.–29.10.99 *12th International Conference on Domain Decomposition Methods (DD12)*, Chiba University. Scientific Committee: P. Bjorstad, J.H. 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

05.–11.09.99 *DMV-Jahrestagung*, Johannes Gutenberg Universität, Mainz. Leitung (gemeinsam mit W. Jäger): Sektion “Mathematische Modellierung in der Medizin”.

Hans-Hermann Frese

24.–28.05.1999 *41st Cray User Group Conference*, Minneapolis, Minnesota, USA

Karin Gatermann

01.–07.08.1999 *EQUADIFF '99*, Berlin

Martin Grötschel

10.–16.01.1999 *Kombinatorische Optimierung*, Oberwolfach

21.05.1999 *Euler-Vorlesung*, Potsdam

05.11.1999 *Eröffnungsveranstaltung des KOBV*, Berlin

07.–13.11.1999 *Verkehrsoptimierung*, Oberwolfach

29.11.1999 *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Ein neuer Start für Benutzer und Bibliotheken*, Berlin

01.–05.12.1999 *The Future of Mathematical Communication*, Berkeley, USA

Monika Kuberek

05.11.1999 *Eröffnung des KOBV und Betriebsaufnahme der KOBV-Suchmaschine*, TU Berlin

Am 05. November wird der KOBV in einer Feierstunde im Sitzungssaal des Akademischen Senats der Technischen Universität Berlin eröffnet. Während der Veranstaltung geben Dr. Wolfgang Hackel, der brandenburgische Minister für Wissenschaft, Forschung und Kultur, und Prof. Dr. Lutz von Puffendorf, Berliner Staatssekretär für Kultur, die KOBV-Suchmaschine für den Routinebetrieb frei. An der Veranstaltung nehmen rund 120 Personen, vorwiegend aus Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken, teil.

18.11.1999 *KOBV-Sitzung des VdDB*, Potsdam

Die Veranstaltung *“Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg - eine neue Entwicklung in der Verbundlandschaft”* wird von der VdDB-Landesgruppe (Verein der Diplom-Bibliothekare an wissenschaftlichen Bibliotheken) gemeinsam mit dem Arbeitskreis Information/Dokumentation Brandenburg an der Universität Potsdam durchgeführt. An der Fortbildungsveranstaltung nehmen mehr als 100 Teilnehmer teil.

Jörg Rambau

19.–20.05.1999 *Berichts- und Antragskolloquium des DFG-Schwerpunkts „Echtzeitoptimierung großer Systeme“*, Bad Honnef

Alexander Reinefeld

25.–26.03.1999 *2. Workshop on Cluster-Computing*, Universität Karlsruhe

12.–14.04.1999 *HPCN Europe '99, 7th International Conference on High Performance Computing and Networking Europe*, Amsterdam, Holland

12.–16.04.1999 *13th International Parallel Processing Symposium and 10th Symposium on Parallel and Distributed Computing*, San Juan, Puerto Rico

03.–06.08.1999 *HPDC '99, 8th International Symposium on High-Performance Distributed Computing*, Redondo Beach, Kalifornien, USA

02.–03.09.1999 *SCI-Europe '99 (als Workshop der Europar '99)*, Toulouse, Frankreich

Carlos Saro

06.-08.10.1999 *Workshop “Warum Standards?”*, Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde und der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin.

Programm und Kurzbericht unter (www.museumsbund.de)

8.5 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

18.–24.03.1999 CeBIT, Hannover::

Demonstration von Programmen zur schnellen Berechnung interferenzarmer Frequenzpläne für GSM-Mobilfunknetze; Andreas Eisenblätter

18.–24.03.1999 CeBIT, Hannover::

Ausstellung des Netzwerk-Dimensionierungstools DISCNET; Roland Wessäly

18.–24.03.1999 CeBIT 1999, Hannover (Halle 1, Stand von Hewlett-Packard)::
Amira – Softwaresystem zur 3D-Visualisierung und Volumenmodellierung;
H.C. Hege, D. Stalling, N. Westerhoff, M. Zöckler

24.03.1999 SARA (Academic Computing Services Amsterdam)::
Einweihung eines Hochleistungsrechners (UNITE) Live-Demonstration:
Coupling Simulation and Visualization with Cactus and Amira; A. Merzky

25.–29.05.1999 Deutscher Bibliothekartag in Freiburg (Breisgau)::
Demonstration der KOBV-Suchmaschine; Monika Kuberek, Stefan Lohrum,
Beate Rusch, Josef Willenborg

Der jährlich stattfindende Bibliothekartag ist die zentrale Informations- und Fortbildungsveranstaltung für Bibliothekare mit Vortragsreihen zu unterschiedlichen Themenkreisen, an dem sich zahlreiche kommerzielle und nicht-kommerzielle Aussteller beteiligen. Auf dem 89. Deutschen Bibliothekartag in Freiburg (Breisgau) wird das KOBV-Projekt in einem Vortrag des Hauptprogramms zum ersten Mal einer großen Fachöffentlichkeit vorgestellt. Am KOBV-Stand, der im Rahmen des gemeinsamen Standes der Arbeitsgemeinschaft organisiert wird, führt die KOBV-Projektgruppe Funktionalitäten der KOBV-Suchmaschine vor.

08.-13.08.1999 SIGGRAPH 99 (Stand von TGS Inc.), Los Angeles (California):
Amira – an Advanced 3D Visualization and Volume Modeling System;
H.C. Hege, M. Zöckler

13.–19.11.1999 Supercomputing '99, Portland (OR):
Live-Demonstration: Remote Simulation and Visualization, an den Mes-
seständen National Computational Science Alliances / National Center
for Supercomputing Applications (NCSA) sowie der Argonne National La-
boratories (ANL), in Kooperation mit dem Albert-Einstein-Institut Pots-
dam und US-amerikanischen Partnern; W. Benger, H.C. Hege, A. Merzky,
H. Busch, W. Häusler

13.–19.11.1999 Supercomputing '99, Portland (OR):
Amira – an Advanced 3D Visualization and Volume Modeling System, am
Messestand von SGI, in Kooperation mit dem Albert-Einstein-Institut Pots-
dam; W. Benger, H.C. Hege

Organisatorisches

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984¹ gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuß des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 1999 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Monika Schäfer-Korting, FUB — bis 31.07.1999
Prof. Dr. Gerhard Braun, FUB — ab 01.08.1999
- Prof. Dr. Elmar Kulke, HU, stellv. Vorsitzender
- StS Prof. Dr. Ingolf Hertel, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe
- Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 13. Dezember 1999.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

¹<http://www.zib.de/org/gesetz/index.de.html>

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.²

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
Prof. Dr. Thomas Liebling	– Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens Sprecher bis 19.05.1999
Prof. Dr. Hanns–Jürgen Lichtfuß	– Technologiestiftung Berlin
Prof. Dr. Alfred Louis	– Universität des Saarlandes, Saarbrücken Sprecher ab 20.05.1999
Dr. Joachim Römelt	– Bayer AG, Leverkusen
Prof. Dr. Karl–Victor von Schönning	– Inpro GmbH, Berlin
Dr.–Ing. Erhard Winter	– E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 17./18. Mai 1999 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group

²<http://www.zib.de/org/satzung/index.de.html>

2. DFN
3. DMV (Fachinformationsmitgliedschaft)
4. ECMI
5. Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin — FAV
6. Forum für Zukunftsenergien
7. Konrad-Zuse-Gesellschaft
8. NAG Users Association
9. SIAM
10. UNICORE Forum e.V.
11. Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V. — ZKI

9.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 1999 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Thomas Wolf (University of London)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 1999 wie folgt zusammen:

Peter Ertmann (Vorsitzender) — bis 22.07.1999, ausgeschieden
Uwe Pöhle (Vorsitzender) — ab 12.08.1999
Wolfgang Dalitz — seit 23.07.1999
Bodo Erdmann
Gabriele Kempf
Wolfgang Maibauer

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist durch die bekannten finanziellen Schwierigkeiten der öffentlichen Hand und der industriellen Kooperationspartner ge-

prägt. Die kontinuierlichen Reduzierungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin mußten durch Reduzierungen der Leistungen aufgefangen werden. Durch die Inanspruchnahme von Rücklagen aus den Vorjahren gelang es, eine gewisse "Abfederung" zu erreichen. Für die entscheidungsreifen investiven Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulich ist anzumerken, daß das Land Berlin erstmals seit dem Jahr 1996 wieder Investitionsmittel für den Höchstleistungsrechner bereitgestellt hat. Diese Gelder ließen einen deutlichen Ausbau des Landeshochleistungsrechners zu. Probleme bei der Planung für den Höchstleistungsrechner Nord führten dazu, daß diese Mittel in Folgejahre verschoben werden mußten.

Einnahmen in den Jahren 1993 — 1999 (TDM)

	Drittmiteleinnahmen		Zuwendungen des Landes Berlin		Einnahmen Sonstige Erträge TDM	Einnahmen insgesamt TDM
	Wirtschaft/ Industrie TDM	öffentliche Mittel TDM	konsumtiv 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 ³	800	237	21.312
1998	1.680	3.767	14.835	850	99	21.231
1999 ⁴	2.108	3.410	14.440	4.330	195	24.483

Die korrigierten Wirtschaftsplanansätze im Jahre 1999 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 26.652 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 19.802 TDM und auf Investitionen 6.850 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuß von 14.440 TDM. Die eigenen Erträge, insbesondere aus Kooperationen und Drittmit-

³Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

⁴voraussichtliches Ist 1999 – vor Prüfung durch den Wirtschaftsprüfer

telprojekten, waren mit 4.525 TDM veranschlagt; ungeachtet einer erfreulichen Steigerung der Drittmiteleinnahmen auf 5.517 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 Forschungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, läßt sich anhand der vorstehenden Tabelle (Jahresabschlußrelevante Angaben) ablesen.

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 teilweise zu Lasten der Sachmittelausgaben vorgenommen werden — ein Zustand der auf Dauer nicht haltbar ist.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.1999	01.01.2000
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	66	70
Datenverarbeitung/Technik	27	24
Verwaltung/Bibliothek	17	15
Studentische Hilfskräfte	33	30
Insgesamt	147	143

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2000 insgesamt 86 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 57 Beschäftigte finanziert.

KAPITEL 10

Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls
Diskrete Mathematik am Fachbereich
Mathematik der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 210

Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Peter Deuffhard	841 85 – 101
Wissenschaftliche Software:	Dr. Ulrich Nowak	841 85 – 175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans-Christian Hege	841 85 – 141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ Dr. Jörg Rambau	841 85 – 210 841 85 – 249
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

Internet: <http://www.zib.de>

E-mail: nachname@zib.de