

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin

Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 2000



Vorwort

Wie in den vergangenen Jahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) auch nach Ablauf des Jahres 2000 allen Freunden, Gönnern und kritischen Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Jahresbericht vor — zugleich als Bestandsaufnahme nach innen und als Rechenschaft nach außen.

Im wissenschaftlichen Bereich ist es uns im vergangenen Jahr gelungen, unsere Aktivitäten in den Anwendungsbereichen *Biotechnologie*, *Medizinische Therapie- und Operationsplanung*, *Telekommunikation*, *Verkehr* und *On-line-Optimierung* im Vergleich zu den bereits äußerst erfolgreichen Vorjahren nochmals weiter auszudehnen. Auch das Drittmiteinkommen konnte, ausgehend von einem bereits beachtlich hohen Sockel in 1999, nochmals leicht gesteigert werden — auf über 7 Mio DM. Damit wurde weit mehr als die Hälfte unserer Mitarbeiter im Bereich Forschung und Entwicklung aus Drittmitteln finanziert. Zugleich wurden auch im Berichtszeitraum wieder unsere wissenschaftlichen Leistungen durch eine Reihe von Auszeichnungen anerkannt: RALF BORNDÖRFER und FRANK LUTZ wurden angesehene Dissertationspreise zugesprochen, KARIN GATERMANN gewann ein Heisenberg-Stipendium, PETER DEUFLHARD wurde mit einem Ehrendoktor der Universität Genf gewürdigt. Im Dezember 2000 erhielt der Bereichsleiter Computer Science, ALEXANDER REINEFELD, einen hochkarätigen Ruf auf einen Canada Research Chair an die Carleton University Ottawa; gemeinsam mit der Humboldt-Universität bemühen wir uns derzeit nach Kräften (und nicht ohne Hoffnung), diesen Ruf abzuwenden.

Ein struktureller Trend, der sich schon im letzten Jahr abgezeichnet hatte, hat sich im Jahr 2000 verstärkt: dem ZIB kommt in der Berliner universitären Landschaft mehr und mehr die Rolle eines Ehrlichen Maklers zu: wir helfen, Synergien freizusetzen und fördern im Rahmen von Verbundprojekten aktiv die Zusammenarbeit der Berliner Universitäten. Im Jahr 1999 hatten sich FU, HU, TFH, MPI für molekulare Genetik und ZIB gemeinsam an der DFG-Ausschreibung *Bioinformatik* beteiligt, leider ohne Erfolg; natürlich nehmen wir diese Entscheidung von DFG-Gutachtern hin, wie Fußballer eine Schiedsrichterentscheidung als Tatsachenentscheidung hinnehmen — auch wenn der Ball eigentlich im Tor war. Unverdrossen haben wir Anfang 2001 einen Antrag im Rahmen der nahezu gleichlautenden BMBF-Initiative gestellt — diesmal mit mehr Aussicht auf Erfolg: nach Vorbegutachtung Anfang 2001 wurden wir ermutigt, ein *Berliner Centrum für genombasierte Bioinformatik* (BCB) mitzugründen. Auch an der

ebenfalls UMTS-getriggerten DFG-Ausschreibung für Forschungszentren haben sich Mitglieder des ZIB maßgeblich beteiligt: Berlin hat einen Vorantrag für ein DFG-Forschungszentrum *Mathematik für Schlüsseltechnologien* eingereicht; die Federführung liegt bei der TU unter Einbeziehung von FU und HU, als Sprecher ist Martin Grötschel vorgesehen, ich selbst bin einer der drei weiteren Initiatoren. Hier harren wir der Dinge, die da kommen sollen.

Das schon lange laufende Projekt KOBV (Kommunaler Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg) wurde Ende 2000 abgeschlossen. Seit Beginn 2001 ist nun die KOBV-Zentrale am ZIB angesiedelt und trägt somit dem Charakter als integrierte Service- und zugleich Entwicklungsaufgabe Rechnung. Diese Konstruktion soll nach Ablauf von drei Jahren auf ihre Tragfähigkeit überprüft werden.

Im Herbst 2000 haben DFG und Wissenschaftsrat — nach mehrjährigem Auf und Ab — dem Konzept der im “Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen – HLRN” zusammengeschlossenen sechs Bundesländer Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein auf Beschaffung eines “föderalen” Hochleistungsrechners zugestimmt. Wir gehen nun davon aus, bis Ende 2001 die neuen massiv parallelen *Supercomputer* in Berlin (ZIB) und Hannover (RRZN) in Betrieb nehmen und damit unseren *Superusern* diese neue Rechnerplattform bieten zu können. Beide Rechner sollen durch *superschnelle Netze* zu einem einzigen “virtuellen Rechner” verbunden werden, was uns die Möglichkeit eröffnet, Metacomputing direkt zu testen und wissenschaftlich weiterzuentwickeln. Zugleich setzen wir Hoffnungen auf das sogenannte *Grid Computing*, das im letzten Jahr konzeptionell gemeinsam mit dem CERN in Genf in Angriff genommen worden ist und sicher in den nächsten Jahren auch am ZIB eine wichtige Rolle spielen wird; Verhandlungen mit dem BMBF laufen derzeit noch.

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 22./23. Mai 2000 und hat diesmal das ZIB sehr genau unter die Lupe genommen. In seinem Bericht ist wörtlich der Satz enthalten: “Berlin kann stolz auf sein ZIB sein, das international aktiv Akzente setzt.” Dies freut uns natürlich. Noch mehr würden wir uns freuen, wenn sich möglichst viele Entscheidungsträger in Politik und Wissenschaft dieser Meinung anschließen und daraus auch Konsequenzen zögen.

Berlin, im April 2001

Prof. Dr. Dr. h.c. 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	17
2.2.1	Molekulare Konformationsdynamik	17
2.2.2	Integrierte Optik	22
2.2.3	Funktionenraumbasierte Optimierungsalgorithmen	26
2.2.4	Prozeßsimulation	28
2.2.5	Medizinische Planungssysteme	33
2.2.6	Virtuelle Labore	43
2.2.7	Diskrete Strukturen	55
2.2.8	Nichtlineare Optimierung	62
2.2.9	Telekommunikation	68
2.2.10	Ganzzahlige Optimierung	79
2.2.11	Online-Optimierung	82
2.2.12	Verkehr	89
2.2.13	Grid Computing	93
2.2.14	Innovative Systemnetzwerke und Cluster Computing	96
2.3	Auszeichnungen und Rufe	97
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	98
3.1	Überblick	98
3.2	Schwerpunkte	100
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	100
3.2.2	Math-Net - ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik	102
3.2.3	Global Info: CARMEN	104

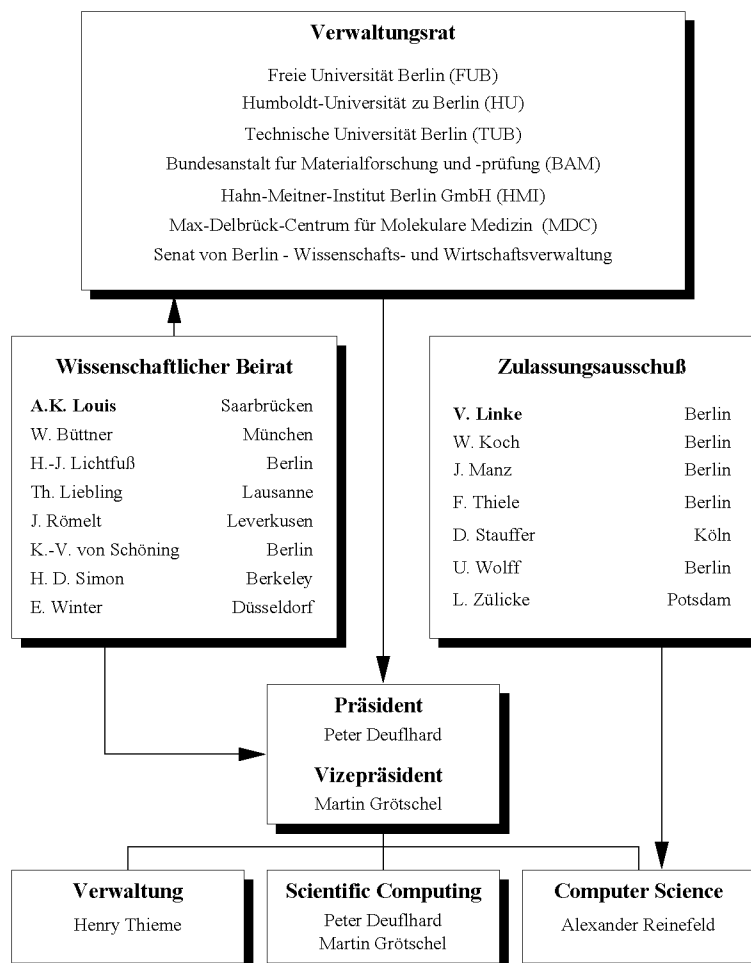
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	105
3.2.5	REDUCE	107
4	Computer Science	110
4.1	Berliner Hochleistungsrechner	110
4.1.1	Systemkonfiguration und Software-Ausstattung	110
4.1.2	Zulassungsausschuß und Großprojekte	114
4.1.3	Sicherheit	116
4.2	Fachberatung	117
4.2.1	Chemie und Bioinformatik	118
4.2.2	Geowissenschaften	119
4.2.3	Ingenieurwissenschaften	120
4.2.4	Physik	121
4.3	Projekte im Bereich Weitverkehrsnetze	122
4.3.1	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	122
4.3.2	Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) des DFN	124
4.3.3	Koordinierung der Berliner Gigabit-Testbed-Projekte . . .	127
4.3.4	Metacomputing in der Quantenchemie	127
4.3.5	Gigabit-Testbed Projekt „GÜTE“	129
4.4	Norddeutscher Hochleistungsrechner (HLRN)	131
5	Publikationen	133
5.1	Preprints	133
5.2	Mitherausgabe von Publikationen	155
5.3	Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden	156
5.4	Monographien	161
5.5	Habilitationen	161
5.6	Dissertationen	161
5.7	Diplomarbeiten	162
6	Produkte	164
6.1	CodeLib	164
6.2	Amira	164
6.3	HyperPlan	165
6.4	DOC++	165

6.5	iTe	165
6.6	VTL	165
6.7	ldasim - Simulator für Speicherhierarchien	166
6.8	dmscp - Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet . .	166
6.9	Beiträge zu Computeralgebra-Systemen	167
6.10	KOBV-Suchmaschine	169
6.11	Fremd- und Normdatenserver	170
6.12	KOBV-Informationsserver	170
6.13	WWW-Z39.50 Gateway	170
6.14	Math-Net Informationsserver	171
6.15	Informationdienste des eLib-Servers	171
6.16	GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	172
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	173
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	173
7.2	Vorlesungen und Seminare	196
8	Tagungen und Gäste des ZIB	200
8.1	Gastvorträge am ZIB	200
8.2	Gastaufenthalte am ZIB	201
8.3	Tagungen und Veranstaltungen des ZIB	203
8.4	Mitveranstalter von Tagungen	205
8.5	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	206
9	Organisatorisches	208
9.1	Organe	208
9.2	Satzung	209
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	209
9.4	Mitgliedschaften	209
9.5	ZIB-Fellows	210
9.6	Selbstverwaltung	210
9.7	Wirtschaftliche Situation	211
9.8	Personelle Entwicklung	212
10	Ansprechpartner	214

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 vor einiger Zeit erfolgte Neubesetzung der Bereichsleiterposition *Computer Science* und die damit verbundene inhaltliche Erweiterung des fachlichen Spektrums am ZIB wird ein neuer Forschungsschwerpunkt *Computer Science* aufgebaut.

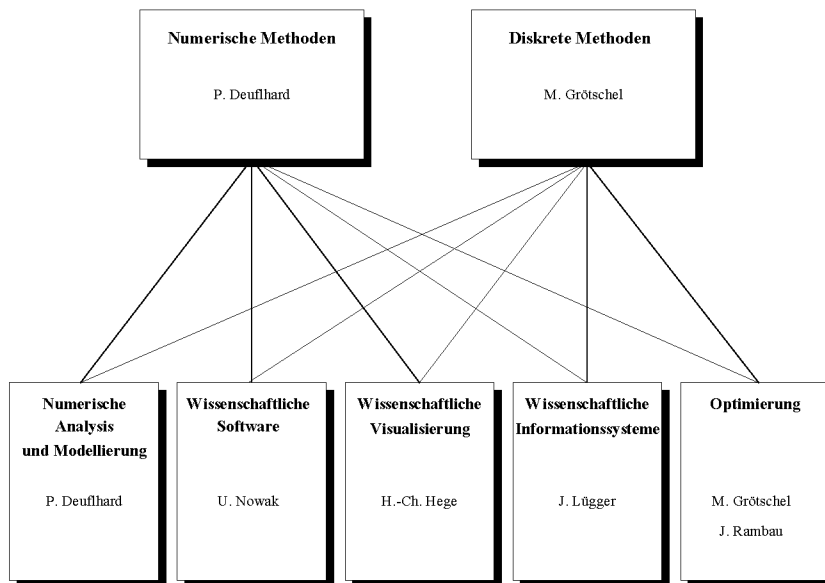
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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.

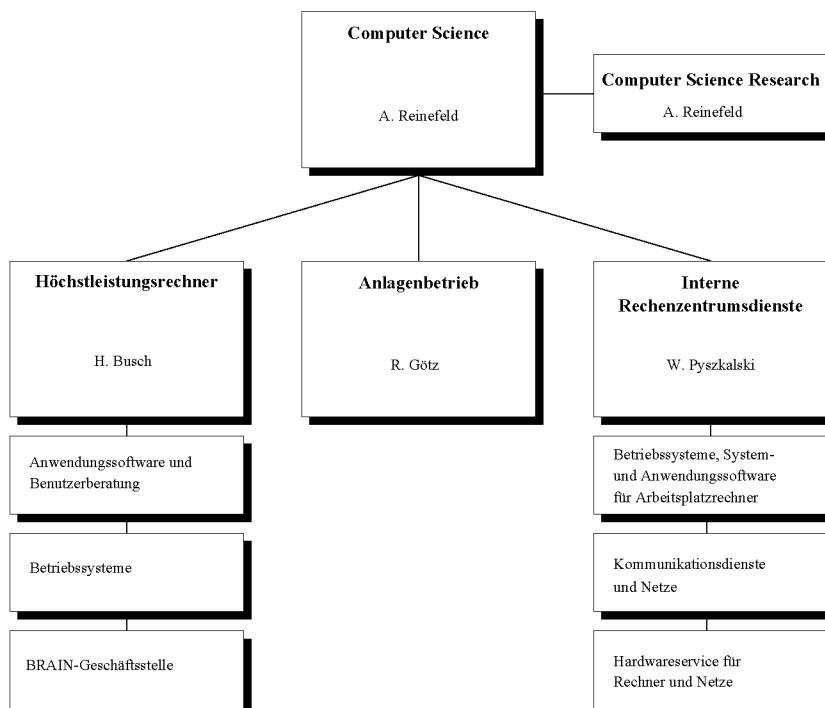
Supercomputing als Dienstleistung

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 (inklusive Optimal Control) 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, computergestützte Chirurgie, 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. Beispielfür Internet-basierte Informationstechnologie sind die Projekte “Informationendienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)” und “Informationstechnische Werkzeuge für Museen”. Im “Kooperativen 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 beziehungsweise künftig im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) 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 (Grid Computing) 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. Im nachfolgenden Kapitel 2.2 werden dann die einzelnen Schwerpunkte der Forschung und Entwicklung in den Bereichen *Scientific Computing* und *Computer Science* zusammen mit wenigen herausgehobenen Projekten aufgeführt.

Zumächst soll der Bereich **Scientific Computing** mit seinen Teilbereichen *Numerische Methoden* und *Diskrete Methoden* vorgestellt werden. Typisch für dieses Gebiet ist eine enge Verflechtung zwischen theoretisch angelegten Grundlagenprojekten, in denen neue Methoden bereitgestellt werden, und auf die Praxis ausgerichteten Anwendungsprojekten.

Der Bereich **Numerische Methoden** des Gebietes Scientific Computing umfaßt die 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 folgenden *methodischen* Schwerpunkte bearbeitet:

- Molekulare Konformationsdynamik
- Adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden
- Funktionenraumbasierte Optimierung
- Virtuelle Labore

Sie sind zu einem Teil Weiterführungen von Schwerpunkten des Vorjahres, zum anderen Teil jedoch neu. Aus der Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit, im wesentlichen wie 1999, in den Feldern

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Medizin: Therapie- und Operationsplanung

- Neurobiologie: Virtuelles Gehirn
- Elektrotechnik: Integrierte Optik
- Chemie- und Verfahrenstechnik: Prozeßsimulation
- Physik: Allgemeine Relativitätstheorie

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

Molekulare Konformationsdynamik. Dieses Thema wird bereits seit drei Jahren am ZIB bearbeitet, bis zum Vorjahr allerdings unter einer etwas anderen Bezeichnung. Durch die Wegberufung von CH. SCHÜTTE auf eine C4-Professur an der FU hat sich die entsprechende Arbeitsgruppe gespalten und zugleich zu einer eng kooperierenden Campus-Arbeitsgruppe weiter entwickelt. In diesem Zusammenhang wurde eine fachliche Entmischung vorgenommen, um jeder Teilarbeitsgruppe eine eigene Identität zu geben. Schwerpunkt der Tätigkeit der ZIB-Arbeitsgruppe ist danach weiterhin der Entwurf von Medikamenten – mit interessanten Nebenwirkungen im weitab liegenden Gebiet des *Data Mining*. 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 üblicherweise in der Bioinformatik realisiert wird.

Im Berichtszeitraum konzentrierte sich die Arbeit auf die numerische Behandlung immer größerer Biomoleküle sowie die Anwendung unserer neuen *Perron-Cluster-Analyse* auf Probleme der Versicherungswirtschaft. Die am ZIB in den letzten Jahren entwickelte deterministisch-stochastische Behandlung der Dynamik von Molekülen führt auf einen stochastischen Übergangoperator, dessen naive Diskretisierung zu einer *kombinatorischen Explosion* in der Anzahl der Diskretisierungsboxen führen würde. Zur Vermeidung dieses sogenannten Fluchs der Dimension wurden im Berichtszeitraum zwei hierarchische algorithmische Konzepte im Rahmen von zwei Dissertationen ausgearbeitet. Die erste Variante, eine *Uncoupling/Coupling-Monte-Carlo-Methode* (UCMC), konstruiert eine hierarchische Folge von Teilproblemen über eine Einbettung bezüglich der Simulationstemperatur. Die zweite Variante zieht Methoden des Data Mining (neuronale Netze, selbstorganisierende Abbildungen nach KOHONEN) heran, um eine effiziente Boxendiskretisierung für eine hybride Monte-Carlo-Methode zu erhalten. Dabei ergab sich ein neues hierarchisches Prinzip durch Erweiterung des bisherigen Punktkonzeptes (SOM: self-organizing maps) auf ein Mengenkonzept (SOBM: *self-organizing box maps*). Diese Variante gestattet eine *adaptive Multi-Level-Methode für neuronale Netze*, an der wir zur Zeit arbeiten. Beide Methoden eignen sich in natürlicher Weise zur Parallelisierung und öffnen so den Weg zu einer erfolgreichen Behandlung realistischer Biomoleküle. Mit diesen neuen Methoden

konnten im Berichtszeitraum erste interessante Anwendungen aus der Biotechnologie und der Molekularen Medizin angegangen werden.

Seit 1999 werden unsere diesbezüglichen Arbeiten in Anbindung an das Berliner RNA-Technologie-Netzwerk RINA (Sprecher: V. Erdmann, Biochemie, FU) durch umfangreiche Mittel aus dem europäischen EFRE-Programm gefördert. Die Begutachtung des Projektes im vergangenen Jahr war erfolgreich; an einer Nachfolgefiananzierung über 2001 hinaus arbeiten wir derzeit. Ebenfalls seit 1999 wird das Forschungsprojekt *Virtuelles Screening* von der Biotech-Firma AnalytiCon Discovery, Potsdam, unterstützt. Der grundlagenorientierte Teil unserer Arbeiten wurde innerhalb des DFG-Schwerpunktes “Dynamische Systeme” (Sprecher: B. FIEDLER, Mathematik, FU) bis zu dessen Auslaufen Mitte 2000 gefördert. Der Aspekt Data Mining wird von der Firma Risk Consulting Prof. Dr. Weyer zum Teil finanziell unterstützt; eine weitere Industriekooperation (yoolia) ist in der Verhandlungsphase.

Integrierte Optik. Dieser Schwerpunkt ist einer von mehreren Schwerpunkten, in denen unser früherer rein methodischer Schwerpunkt *adaptive Multilevelmethoden* aufgegangen ist. Die Arbeiten innerhalb eines BMBF-Projektes zur Berechnung von Moden verlustbehafteter integriert-optischer Komponenten wurden im Jahr 2000 äusserst erfolgreich abgeschlossen. Das von uns implementierte Programmpaket **Modelab** enthält nun eine Reihe von uns neu entwickelter adaptiver Mehrgitter-Eigenwertlöser für optische Wellenleiter. Der in Abbildung 2.3 abgebildete MQW-Laser konnte in einem internen Vergleich der Industrie von unserer Methode als weltweit einziger in voller Modellierung numerisch gelöst werden. Als Konsequenz daraus ergab sich sofort eine direkte Industriekooperation mit der Firma IOS, die darüber hinaus in 2001 möglicherweise zu einer weiteren Spin-off Firma des ZIB führen könnte.

Ebenfalls weitergeführt wurde im Berichtszeitraum die theoretische und algorithmische Konstruktion *diskreter transparenter Randbedingungen* für wellenartige partielle Differentialgleichungen, wie sie neben der Optik auch in der Akustik und Quantenmechanik (Schrödinger-Gleichung) auftreten. Auf der Basis einer eingehenden theoretischen Untersuchung konnte die *perfectly matched layer* (PML) Methode in neuer Weise in ihren Anwendungsgrenzen verstanden werden und darauf aufbauend neuartige Spektral-Methoden vorgeschlagen werden; diese Arbeiten reichen schon ins Jahr 2001 hinein. Sie werden zugleich die Grundlage bilden für unsere Kooperation mit der Arbeitsgruppe VOGES (Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund). Diese Arbeiten werden durch zwei DFG-Projekte gefördert.

Funktionenraumbasierte Optimierung. Dieser Schwerpunkt wurde in den letzten Jahren zunächst im Rahmen einer Dissertation (WEISER) theoretisch vorbereitet und taucht dieses Jahr zum ersten mal neu auf. Ziel ist, die Vorzüge sogenannter *direkter* und *indirekter* Methoden zur Lösung von Problemen der *optimalen Steue-*

runge konzeptionell, nicht im Sinne eines Hybrid-Verfahrens, zu vereinen und dabei die jeweiligen Nachteile zu vermeiden: angestrebt wird die robuste und verlässlich genaue Lösung von Optimal-Control-Problemen ohne die bisher nötige mühsame analytische Vorarbeit. Ausgangspunkt unserer neuen Herangehensweise ist die Behandlung der Probleme durch eine neuartige funktionenraumbasierte Innere-Punkt-artige (IP) Methode, in der eine *adaptive Multilevelmethode auch für die Steuervariablen* realisiert werden kann. Die Erweiterung von IP-Methoden von endlicher zu unendlicher Dimension ist nicht-trivial, da diesem Vorhaben zum Teil subtile theoretische Widerstände entgegenstehen. Man bedenke nur, daß die Konvergenzrate bei Dimension n nur durch $1 - \text{const}/\sqrt{n}$ abgeschätzt werden kann, was für $n \rightarrow \infty$ unbefriedigend ist. In der Tat ist bekannt, daß das Konzept der logarithmischen Barrier-Funktionen im Unendlichdimensionalen nicht tragfähig ist (vgl. JARRE 1999). Glücklicherweise gilt dies nicht für die Komplementaritäts-Formulierung, insbesondere existiert der *zentrale Pfad* auch im Grenzübergang. Damit lassen sich *affin-invariante adaptive Fortsetzungsmethoden* aus der Habilitation DEUFLHARD von 1978 direkt konzeptionell übertragen. Ein erster Vergleich mit gängigen Verfahren zur Berechnung optimaler Steuerungen (Mehrzielmethode, Kollokationsmethode) an dem bekannt kniffligen Problem eines *Landeabbruch-Manövers bei Scherwinden* dokumentiert eindrucksvoll die Leistungsfähigkeit bereits unserer derzeitigen algorithmischen Pilotversion. Aus diesem Schwerpunkt könnten sich interessante Querverbindungen zu anderen Arbeitsgruppen der nichtlinearen Optimierung des ZIB ergeben. Ideen aus diesem Umfeld sollen auch in eine Neuformulierung des Optimierungsalgorithmus eingehen, der in der Hyperthermieplanung eingesetzt wird (siehe Schwerpunkt *Medizinische Planungssysteme*).

Prozeß-Simulation. Die Simulation zeitabhängiger Prozesse in Chemie und Verfahrenstechnik ist ein schon über Jahre laufender Schwerpunkt. In der seit Jahren bewährten Kooperation mit der Arbeitsgruppe ADLER (Ingenieurwissenschaften, Universität Halle-Wittenberg) wurden Verfahren zur effizienten Simulation von Kombinationsreaktormodellen auf der Basis unseres linear-impliziten *Extrapolationscodes* LIMEX weiterentwickelt. In der ebenfalls langjährigen Kooperation mit der Arbeitsgruppe SCHABER (Verfahrenstechnik, Universität Karlsruhe) wurden die Arbeiten zur Modellierung und Simulation von Aerosolbildung in verfahrenstechnischen Anlagen unter Einschluss der Behandlung der Populationsbilanzen fortgeführt. Im Rahmen dieser Kooperation kam zunächst der *adaptive Multilevel-FEM-Code* KARDOS zum Einsatz. Beide Kooperationsprojekte wurden im Berichtszeitraum durch die DFG gefördert. Darüber hinaus konnten durch Software-Lizenzen erfreuliche zusätzliche Einnahmen aus der Industrie erzielt werden.

Medizinische Planungssysteme. Dieser Schwerpunkt hat sich im Berichtszeitraum enorm entfaltet. Im zentralen Projekt „Algorithmen zur Planung und Kontrolle von Hyperthermiebehandlungen“ innerhalb des Sonderforschungsbereichs 273 „Hyperthermie: Methodik und Klinik“ wurden eine Reihe von neuen Ergebnis-

sen erzielt. Für die Modellierung von virtuellen Patienten wurden Algorithmen zur Extraktion von Gefäßbäumen aus 3D-Bilddaten entwickelt sowie Verfahren zur Erzeugung von glatteren Oberflächengittern. Durch Simulationsstudien wurden wesentliche Designparameter künftiger Behandlungsgeräte, wie Anordnung, Zahl und Frequenz der Antennenringe optimiert. Es wurde ein Prototyp eines modularen Hyperthermie-Applikators entwickelt – ein erster Schritt zu einem Hybridsystem, in dem Behandlungs- und MRT-Gerät integriert werden. Nach Begutachtung der zweiten Phase wurde der Sonderforschungsbereich leider zum 31.12.2002 beendet, wobei nur wenige Kernprojekte bis zu diesem Zeitpunkt weiter gefördert werden, unter ihnen das Teilprojekt des ZIB, das als einziges mit „sehr gut“ beurteilt wurde und die beantragten Mittel ungekürzt erhält. Die positiv beurteilten Kernprojekte des Sonderforschungsbereichs wurden ermutigt, danach auf eine andere DFG-Förderbasis umzustellen.

Das Projekt zur computergestützten 3D-Operationsplanung und Weichgewebesimulation für die *MKG-Chirurgie* konnte in kürzester Zeit beachtliche Resultate vorweisen. Es wurden Konzepte und Verfahren zur optimalen Unterstützung der Operationsplanung und zur Vereinfachung der Planungsschritte entwickelt. Für die Prognose der Weichgewebeanordnung wurde ein Modellierungsansatz erarbeitet und numerisch umgesetzt. In enger Kooperation mit der Klinik und Poliklinik für Mund-Kiefer-Gesichts-Chirurgie der TU München (Klinikum rechts der Isar, Dr. Dr. Zeilhofer, Dr. Dr. Sader) konnten gar bereits Planungen für reale klinische Fälle durchgeführt werden – was uns in die vorderste Reihe der kompetitiven internationalen Entwicklung setzt.

Ein neues medizinisch orientiertes Projekt, die *Lichtring-Endoskopie*, bei dem Bronchialstrukturen geometrisch vermessen werden sollen, bietet interessante Bildanalyseaufgaben. Hierfür wurden prototypisch Algorithmen entwickelt und in Zusammenarbeit mit dem Entwickler des Endoskops sowie einer Klinik getestet, um die Anforderungen hinsichtlich Präzision, Robustheit und Funktionalität noch genauer zu fassen.

Virtuelle Labore. Das erfolgreiche Konzept der virtuellen Labore als anwendungsbezogene, integrierte Forschungsumgebung, basierend auf der Software Amira, wurde weiter vervollkommen. Eine wesentliche Rolle spielte hier die Kooperation mit dem ZIB Spin-Off *Indeed - Visual Concepts*, die eine stabile, dokumentierte state-of-the-art Softwarebasis für alle wichtigen Rechnerplattformen garantierte. Die Kooperation führte nicht nur zu finanziellen Erträgen, sondern eröffnete auch eine Reihe von neuen Kontakten zu Anwendern, die in künftige Forschungsprojekte einfließen könnten.

Das Virtuelle *Neurolabor* wurde um vielfältige Funktionen ergänzt, wie etwa Alignment von Bilddatensätzen, bessere Geometrie-Rekonstruktion und Werkzeuge zur Quantifizierung anatomischer Variabilität. Diese Tools konnten erfolgreich für verschiedene neurobiologische Fragestellungen eingesetzt werden.

Der BMBF-Projektverbund „Virtuelles Gehirn“ wurde um drei weitere Jahre verlängert, wobei es sich als sehr hilfreich erwies, daß sich nun auch der ZIB Spin-Off Indeed - Visual Concepts in dem Forschungsprojekt engagiert. In einem neuen, von der European Space Agency (ESA) geförderten internationalen Forschungsprojekt wird ein virtuelles Labor für die quantitative Analyse der *Gewebsstruktur von Knochen*, z.B. im Hinblick auf osteoporotische Veränderungen, entwickelt. Das virtuelle *Moleküllabor* wurde um eine Vielzahl von Funktionen erweitert, insbesondere um spezielle Verfahren zur Visualisierung großer Moleküle sowie zum Vergleich von Konformationen (siehe Schwerpunkt *Molekulare Konformationsdynamik*).

Für das im Rahmen der Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut, Potsdam/Golm) entwickelte virtuelle *Astrophysiklabor* wurden neue Visualisierungsverfahren für Daten auf adaptiv verfeinerten, hierarchischen Gittern sowie ein allgemeines Datenmodell zur Repräsentation wissenschaftlicher Daten erarbeitet. In einem vom DFN/BMBF geförderten Projekt wurden grundlegende Techniken entwickelt, um Daten entfernter Applikationen zu visualisieren und deren Steuerung direkt aus dem virtuellen Labor heraus durchzuführen.

Der Bereich **Diskrete Methoden** des Gebietes **Scientific Computing** 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 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 wird u. a. dokumentiert durch zahlreiche Drittmittelförderungen (von Seiten des BMBF, der DFG, des DFN und der Industrie) und Auszeichnungen für Mitarbeiter der Abteilung (Dissertationspreis der Gesellschaft für Operations Research für Ralf Borndörfer, Richard-Rado-Dissertationspreis für Frank Hagen Lutz).

Die Aktivitäten unseres Bereiches im Berichtszeitraum 2000 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 Punktconfigurationen – in Dimension zwei ein Schwerpunkt in der algorithmischen Geometrie – erfordert Kenntnisse über die Struktur des Raums aller Triangulierungen der Punktconfiguration. 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. Im neuen Projekt *Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen* werden

unsere Methoden angewendet und problemspezifisch weiterentwickelt; die Zusammenarbeit mit der Ruhrgas AG, Essen, wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

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), der Siemens AG (München) und der Telekom Austria AG ist im vergangenen Jahr die T-Nova Deutsche Telekom Innovationsgesellschaft mbH hinzugekommen. Die verwendeten mathematischen Methoden reichen von Schnittebenen- und Spaltengenerierungsalgorithmen sowie demidefiniter Programmierung über primale und duale Heuristiken bis hin zu Verfahren, die auf der Warteschlangentheorie basieren. Wir untersuchen nun auch die überwiegend optisch geschalteten Telekommunikationsnetze der Zukunft, deren ausfallsichere und kostengünstige Konfiguration die Industrieunternehmen nach eigenen Aussagen noch nicht beherrschen.

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, mit der dynamischen Konfiguration optischer Telekommunikationsnetze und der automatischen Fahrzeugeinsatzplanung. Zur Analyse von Online-Algorithmen setzen wir dabei als mathematisches Hilfsmittel sowohl klassische Methoden (kompetitive Analyse) als auch neue Methoden (vertretbare Belastung) ein. Die Projekte dieses Themenkreises werden gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft und – seit kurzem – vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (Berlin) und dem Allgemeinen Deutschen Automobilclub (ADAC). Desweiteren kooperieren wir mit der Herlitz PBS AG (Berlin) und der T-Nova Telekom Innovationsgesellschaft mbH.

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 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.

Der Bereich **Computer Science** deckt mit seiner Arbeitsgruppe *Computer Science Research* ein breites Forschungsspektrum ab, das von hardwarenahen Arbeiten an innovativen Kommunikationsnetzwerken bis zur Entwicklung von Systemsoftware, der sogenannten Middleware, für die kooperative Nutzung geographisch verteilter Supercomputer reicht. Das verbindende Element zwischen diesen beiden Themenbereichen liegt in der effizienten Nutzung der zugrunde liegenden Hardware- und Softwarekomponenten. Auf den untersten Schichten aufbauend

¹Bundesminister Reinhard Klimmt, Berlin, 22. Oktober 1999

entwickeln wir höherwertige Dienste, die erst den effizienten und benutzerfreundlichen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen.

Neben den beiden im Folgenden näher beschriebenen methodisch orientierten Forschungsschwerpunkten

- Grid Computing und
- Innovative Systemnetzwerke und Cluster Computing

haben wir im Laufe des Jahres 2000 auch in einer Anwendungsdisziplin gearbeitet, der Bioinformatik. Zunächst wurden hier einige einfache Sequenz-Alignment-Algorithmen so modifiziert, daß sie auf klassischen Parallelrechnern (z.B. vom Typ CRAY T3E) und auf Cluster-Systemen effizient ablauffähig sind. Bioinformatik-Anwendungen sind für uns ein besonders interessantes Studienobjekt, weil sie nicht nur einen sehr hohen Rechenzeitbedarf aufweisen, der allein schon eine Parallelisierung rechtfertigt, sondern weil sie mit ihren breiten Datenströmen sehr große Anforderungen an die Bandbreite und Latenzzeit der internen Verbindungsnetzwerke der Parallelrechner stellen. Da diese Arbeiten aber erst am Anfang stehen, können konkrete Forschungsergebnisse erst im nächsten Jahresbericht vorgestellt werden.

Grid Computing. Im Forschungsschwerpunkt Grid Computing lag unser Hauptaugenmerk auf der Entwicklung besserer Methoden zum Management geographisch verteilter Ressourcen. Unter „Ressourcen“ verstehen wir nicht nur eine Ansammlung von (Hochleistungs-)Rechnersystemen, sondern auch verteilte Datei- und Archivsysteme, Netzwerke, Visualisierungskomponenten, Softwarepakete und sonstige Dienste. Das Ziel ist es, diese Ressourcen in einem überregionalen Lastverbund zur Verfügung zu stellen, ohne daß der Benutzer besondere Vorkehrungen für die Auswahl und den optimalen Einsatz der Zielsysteme treffen muß. Das Gesamtsystem soll sich so verhalten, als wären alle Teilkomponenten am Arbeitsplatz direkt verfügbar. Damit steht den Nutzern über die bisher gewohnten Zugriffsmechanismen ein Dienst von höherer Qualität zur Verfügung und die Systembetreiber erreichen eine höhere Auslastung der kostenintensiven Hard- und Software.

Während in den früheren Jahren der Fokus unserer Forschungsarbeiten primär auf der Kopplung von Systemen zur Erzielung einer insgesamt höheren Rechenleistung für einzelne, speziell dafür entwickelte Anwendungen lag (z.B. GAMESS-UK, CACTUS), so richtet sich nun unser Interesse zunehmend auf das Management geographisch verteilter Daten. Die dabei auftretenden Probleme des Caching, Stagings, Routings, der Synchronisierung und Replikation sind mindestens ebenso schwer lösbar wie die des Scheduling und Mappings von Algorithmen auf verteilten Systemen. In beiden Fällen spielt die Dynamik der beteiligten Komponenten (Netzwerke, Speicher, Rechenknoten) eine zentrale Rolle.

Hintergrund unserer Fokussierung auf das Management verteilter Daten ist das

Anfang 2001 begonnene EU Projekt *DataGrid*, in dem ein Netz weltweit verteilter Hochleistungsrechner zur Auswertung der am CERN in den LHC-Experimenten (LHC = large hadron collider) anfallenden Daten konzipiert und installiert werden soll. Die Datenmengen sind so groß (einige Petabyte, d.h. 2^{50} Byte pro Jahr), daß die Speicherung und Auswertung nicht mehr allein am CERN stattfinden kann. Damit ist *DataGrid* weltweit das erste Projekt, das zwingend auf den Einsatz des Grid Computing angewiesen ist! Die Physiker am CERN haben dies erkannt und streben daher eine enge Zusammenarbeit mit den Informatikern an.

Innovative Systemnetzwerke und Cluster Computing. In unserer Arbeitsgruppe Cluster Computing standen der Aufbau eines kleinen Linux-Clusters sowie unsere Forschungs- und Entwicklungsarbeiten über schnelle Systemnetzwerke im Vordergrund. Dabei ging es nicht nur um die reinen Hardware-Aspekte, wie z.B. den Einsatz und die Erprobung verschiedener Adapterkarten und Chipsätze, sondern auch um die Weiterentwicklung der erforderlichen Systemsoftware, d.h. der Treibersoftware und Kommunikationsbibliotheken. Nachdem wir uns in den letzten Jahren schwerpunktmäßig mit den sehr schnellen, aber auch recht teuren SCI-Adapterkarten (SCI = Scalable Coherent Interface) beschäftigt haben, stand nun die effiziente Nutzung preiswerter Standard-Adapterkarten, wie z.B. Gigabit-Ethernet, im Vordergrund. Im Berichtsjahr wurde u.a. ein neues Übertragungsprotokoll, *Scheduled Transfer*, auf Gigabit-Ethernet implementiert und erfolgreich erprobt. Erste Ergebnisse zeigen, dass Scheduled Transfer gegenüber anderen Protokollen (z.B. TCP) eine etwas geringere Latenzzeit bei gleichzeitig reduzierter CPU-Belastung bietet, wodurch letztlich der Anwendung mehr nutzbare Rechenleistung zur Verfügung steht.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Molekulare Konformationsdynamik

Dieser Schwerpunkt ist eine Fortschreibung und zugleich Einengung des früheren Schwerpunktes "Wesentliche Moleküldynamik". Seit Anfang 2000 hat sich die zugehörige Arbeitsgruppe in eine an der FU angesiedelte (AG Prof. Ch. Schütte) und eine am ZIB verbliebene geteilt. Der Teilung entspricht eine Entmischung fachlicher Aspekte bei gleichzeitiger enger Kooperation.

Selbstorganisierende neuronale Netze

Bearbeitet von: Tobias Galliat, Peter Deuffhard, Rainer Roitzsch und Frank Cordes

Kooperationspartner: Ch. Schütte, W. Huisinga, A. Fischer (FU Berlin)

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin aus Mitteln der Europäischen Union (EFRE); Risk-Consulting, Prof. Dr. Weyer, Köln; Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

In den vergangenen Jahren stand die Entwicklung der Theorie zur statistischen Beschreibung der Dynamik von Konformationsänderungen molekularer Systeme und ihre algorithmische Realisierung im Vordergrund. Die Identifikation von metastabilen Konformationen wurde dabei auf die Lösung des Perron Cluster Eigenwertproblems für den die Dynamik widerspiegelnden Markov - Operator zurückgeführt. Letzterer muß hierzu geeignet diskretisiert werden. Die Schwierigkeit, eine geeignete Diskretisierung zu finden, steigt dabei mit der Komplexität des untersuchten Moleküls. Eine anfangs als vielversprechend erscheinende Komplexitätsreduktion durch Konzentration auf die sogenannten wesentlichen Freiheitsgrade bietet keine Lösung, sie verschiebt lediglich die Grenze der behandelbaren Molekülgrößen. Deshalb wurde im Berichtszeitraum der Fokus auf die Entwicklung und Realisierung von Diskretisierungsverfahren gelegt, die auch für komplexere Moleküle geeignet sind. Die bereits Ende 1999 in ersten Versuchen als vielversprechend erscheinende Verwendung von selbstorganisierenden neuronalen Netzen stand dabei im Mittelpunkt der Aktivitäten. Als deren Resultat wurde der Self-Organizing Box Maps (SOBM) Algorithmus [1] entwickelt, eine Erweiterung des bekannten SOM-Algorithmus von KOHONEN. Zusammen mit dem bereits früher entwickelten Algorithmus zur Perron - Cluster - Analyse [2, 3] steht mit diesem neuen Algorithmus nun ein voll automatisiertes Verfahren zur Berechnung metastabiler Konformationen zur Verfügung. Die Konformationsanalyse von pharmazeutisch relevanten Molekülen ist nun durchführbar und wurde im weiter unten genannten Virtual Screening - Projekt erfolgreich eingesetzt [4].

Abbildung 2.1 zeigt zwei metastabile Konformationen eines HIV - Protease - Inhibitors. Bei hoher Simulations-Temperatur können wenige Konformationen mit Hilfe von SOBM-Algorithmus und Clusteranalyse identifiziert werden. Der

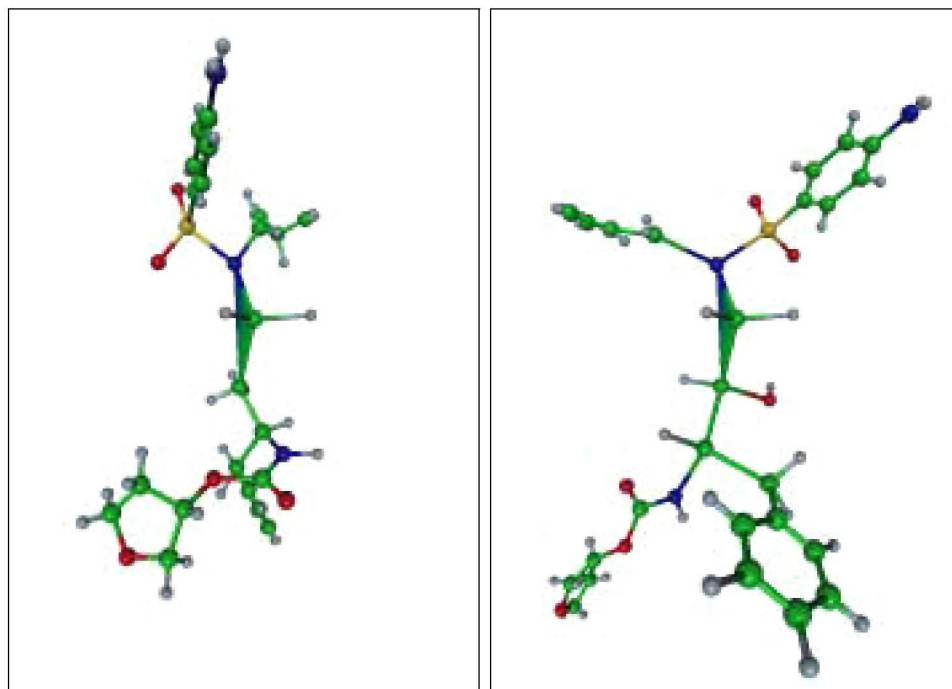


ABBILDUNG 2.1: Zwei Konformationen eines HIV - Protease - Inhibitors: Gemittelte Konfigurationen für zwei von sechs identifizierten Konformationen bei $T = 1000 K$.

SOBM-Ansatz stellt die Voraussetzung dar, gezielt HMC Simulationen innerhalb der Konformationsgebiete durchzuführen. Hierdurch lassen sich die “langsam mischenden” Markov-Ketten in “schnell mischende” zerlegen und so eine deutliche Konvergenzbeschleunigung der Simulation erreichen [5].

Virtual Screening

Bearbeitet von: Michael Meyer, Frank Cordes und Peter Deuffhard

Förderung: AnalytiCon Discovery GmbH (Potsdam)

Virtuelles Screening soll die Entwicklung von Medikamenten beschleunigen, indem zur Reduktion des experimentellen Aufwands geeignete Moleküle aus Bibliotheken ausgewählt werden. Die Besonderheit des am ZIB entwickelten Verfahrens liegt in einer einmaligen *dynamischen* Konformationsanalyse aller Moleküle einer Bibliothek und der Anreicherung der Bibliotheken mit physikochemisch relevanten Strukturen, den metastabilen Konformationen. Zum Screening werden Descriptoren abgeleitet, mit denen Datenbanken nach potentiellen Wirkstoffen durchsucht werden. Im Anschluß an das schnelle Screening soll das vollflexible Docking zur Berechnung der Struktur des Protein Ligand Komplexes erfolgen. Dieser Schritt ermöglicht ein detaillierteres Verständnis der Wechselwirkungen zwischen dem Liganden und seinem Target auf atomarer Ebene und eröffnet so

die Möglichkeit zur Optimierung von Leitstrukturen, die wiederum bei der Entwicklung von Medikamenten von Nutzen sind.

In diesem Projekt wurde zunächst das MMFF94-Kraftfeld implementiert. Diese empirische Energiefunktion ermöglicht jetzt die Durchführung von Hybriden Monte Carlo (HMC) Simulationen von nahezu beliebigen (bio)organischen Molekülen zur Konformationsanalyse und zur Datenbankanreicherung. Zum virtuellen Screening wurde ein Verfahren zur automatischen Aufstellung von Pharmacophor - Modellen auf der Basis von aktiven Analogverbindungen entwickelt. Diese Modelle basieren auf der Annahme, daß einige wenige Atome oder Molekülfragmente für Wechselwirkungen mit einem Biopolymer essentiell sind. Zur Validierung des Verfahrens wurden 1000 Moleküle zufällig aus der AMBINTER - Datenbank ausgewählt und eine Konversion der Strukturformeln in dreidimensionale Koordinaten durchgeführt. Diese Bibliothek wurde mit wenigen bereits bekannten Inhibitoren biomedizinischer Targets ergänzt. Anschließend wurden für alle 1000 Moleküle Markov Ketten mit einem HMC-Algorithmus [6] generiert. Das hochparallele Simulationsverfahren ermöglichte bei einer Simulation auf 180 Prozessoren der Cray T3E des ZIB eine Produktionszeit der Daten von nur 2 Stunden. Beim Durchsuchen der Trajektorien auf der Basis von Pharmacophor - Modellen, konnten 90% der voraussichtlich inaktiven Moleküle aussortiert werden, ohne daß nennenswerte Verluste bei den tatsächlichen Inhibitoren auftraten. Die effiziente Selektion von relevanten Molekülen durch Pharmacophormodelle schränkt die Anzahl so weit ein, daß mit dieser geringen Zahl von Molekülen zukünftig das wesentlich aufwendigere völlig flexible Protein Ligand Docking möglich sein wird.

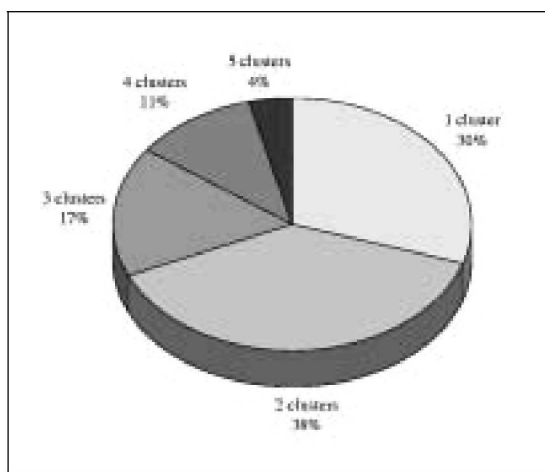


ABBILDUNG 2.2: **Virtuelles Screening von 1000 Molekülen:** Anzahl der identifizierten metastabilen Konformationen

Die Analyse der Trajektorien mit Self-Organizing Box Maps (SOBM) zeigt (Abbildung 2.2), daß der Zustandsraum der Mehrzahl der Moleküle der Bibliothek

durch wenige metastabile Konformationen repräsentiert werden kann [4]. Daher ist es nach einer derartigen Analyse der Bibliothek nicht mehr erforderlich, komplette Trajektorien für jedes Molekül zu speichern. Daraus folgt wiederum eine weitere Steigerung der Effizienz der Datenbanksuche und eine Reduzierung des Speicherplatzes der Bibliotheken, so daß mit diesem Verfahren auch ein virtuelles Screening von Bibliotheken in einer Größenordnung von 100000 Molekülen möglich sein wird.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Uncoupling-Coupling Monte Carlo (Frank Cordes, Peter Deuffhard) In Zusammenarbeit mit der FU Berlin (A. Fischer, C. Schütte) wurde die molekulare Konformationsanalyse mit dem Uncoupling/Coupling Monte Carlo Verfahren [5] kombiniert. Die Verbesserung der Konvergenzeigenschaften sowie das Verfahren der Umgewichtung von Simulationsdaten bei verschiedenen Temperaturen konnten an kleinen Molekülen erfolgreich getestet werden. Die idealen Parallelisierungseigenschaften des Verfahrens machten es möglich, den hohen Simulations- und Datenaufwand der Testphase innerhalb eines ZIB-Großprojekts auf der Parallelarchitektur der CRAY T3E durchzuführen.

Parallele Programme zur Simulation und Analyse von Molekülen (Frank Cordes, Rainer Roitzsch)

Monte Carlo Simulation und Konformationsanalyse von Molekülen wurden in zwei eigenständigen Programmcodes implementiert. Der Datenaustausch erfolgt über ein am ZIB entwickeltes Datenformat, welches einen schnellen Zugriff auf die komplexen Kraftfelder, Topologien und Trajektorien der Moleküle erlaubt. Dasselbe Datenformat wird auch von der Visualisierungssoftware Amira unterstützt (Schwerpunkt 2.2.6). Speziell für das "Virtual Screening" Projekt wurden die Programme parallelisiert, um die Moleküle einer großen Molekülbibliothek auf mehreren Prozessoren gleichzeitig behandeln zu können.

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

Die im Herbst 1999 gestarteten Aktivitäten im Bereich Data-Mining mit dem Ziel der Entwicklung und Anwendung effizienter Methoden zur automatischen Analyse von großen Datenmengen (Massendaten) wurden planmäßig weitergeführt. In Kooperation mit der Firma Risk-Consulting, Prof. Dr. Weyer (Köln) wurde der neu entwickelte SOBM-Algorithmus [1] erfolgreich auf kleineren Datensätzen aus dem Versicherungsbereich getestet. Für das kommende Jahr ist ein ausgiebiger Praxistest im Rahmen eines Projektes mit großer Datenbasis geplant.

Dynamische Profilierung (Tobias Galliat; Förderung: yoolia AG, Berlin)

In Kooperation mit dem Berliner Start-up Unternehmen yoolia wurde eine neuartige Technik zur dynamischen Profilierung entwickelt. Ziel ist die automatische und in Echtzeit erfolgende Generierung von personalisierten Angeboten im Inter-

net (z.B. im e-commerce Bereich) aufgrund von beobachtetem Kunden- und Userverhalten. Die entwickelten Basis-Methoden des Matchmaking und Influencing wurden auf der Internet-Plattform yoolia.de ausgiebig im Praxiseinsatz getestet.

Simulationsanwendungen auf Biomoleküle (M. Meyer)

Mit dem Institut für Molekulare Biotechnologie in Jena (J. Sühnel) wurden quantenchemische Simulationen an wasservermittelten Nucleinsäurebasenpaaren zur Analyse der Struktur und der intermolekularen Wechselwirkungen durchgeführt. Die bisherigen Simulationen an Guanin-Quartetts wurden auf weitere ungewöhnliche Quartetts ausgedehnt, deren Strukturen kürzlich NMR - spektroskopisch untersucht wurden. Durch die Simulationen konnten neue Erkenntnisse über kooperative Effekte in Nucleinsäurekomplexen und zur Wechselwirkung cyclischer Quartetts mit Metallionen gewonnen werden, die experimentell bisher nicht zugänglich waren.

Publikationen

- [1] T. Galliat, P. Deuffhard, *Adaptive hierarchical cluster analysis by Self-Organizing Box Maps*, Report 00-13, ZIB, 2000.
- [2] T. Galliat, W. Huisinga, and P. Deuffhard, *Self-Organizing Maps Combined with Eigenmode Analysis for Automated Cluster Identification*. In: H. Bothe und R. Rojas (eds.) *Proceedings of the 2nd International ICSC Symposium on Neural Computation*, pages 227–232, ICSC Academic Press, 2000.
- [3] P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, and Ch. Schütte. *Identification of almost invariant aggregates in nearly uncoupled Markov chains*, Linear Algebra and its Applications 315, pages 39–59, 2000.
- [4] T. Galliat, P. Deuffhard, R. Roitzsch und F. Cordes, *Automatic Identification of Metastable Conformations via Self-Organized Neural Networks*, Report 00-51, ZIB, 2000.
- [5] A. Fischer. *An Uncoupling-Coupling Technique for Markov Chain Monte Carlo Methods*, Report 00-04, ZIB, 2000.
- [6] 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.
- [7] P. Deuffhard, *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs. Computational Mathematics Driven by Industrial Problems*, Lecture Notes in Mathematics 1739, Springer-Verlag, pp. 69-125 (2000).

- [8] Ch. Schütte, W. Huisinga und P. Deuffhard, *Transfer Operator Approach to Conformational Dynamics in Biomolecular Systems*, Preprint SC 99-36, ZIB, 2000. Erscheint in "Ergodic Theory, Analysis, and efficient simulation of dynamical systems", Ed.: B. Fiedler, Springer–Berlin 2001.

2.2.2 Integrierte Optik

In diesem Schwerpunkt werden Projekte von der Simulation integriert-optischer Halbleiterkomponenten bis hin zur Signalübertragung auf optischen Glasfasernetzen bearbeitet. Im Mittelpunkt der Arbeiten des Berichtsjahres standen einerseits die Weiterentwicklung von Theorie und Algorithmen zur Lösung von optischen Streuproblemen, die durch die Helmholtz-Gleichung modelliert werden, und andererseits die Weiterentwicklung des in den Vorjahren entwickelten Mehrgitter-Algorithmus für die Lösung des Eigenwertproblems der Maxwell'schen Gleichungen in optischen Wellenleitern (Förderung durch das BMBF). Dieser Algorithmus wird in ein kommerzielles Softwareprodukt integriert werden. Neu bearbeitet wurden zeitabhängige Randbedingungen für die lineare Schrödingergleichung in zwei Raumdimensionen (Förderung durch die DFG) und die Signalübertragung über optische Fasern im nichtlinearen Bereich, die durch eine nichtlineare Schrödingergleichung modelliert wird (Förderung durch das BMBF).

Diskrete transparente Randbedingungen für die Helmholtzgleichung

Bearbeitet von: F. Schmidt, L. Zschiedrich, T. Hohage

Kooperationspartner: D. Yevick, University of Waterloo, Canada

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Viele in der Optik auftretende Streuprobleme lassen sich nicht in der üblichen Weise als beugendes, brechendes oder reflektierendes Hindernis mit homogenem Außenraum modellieren. Beispiele sind durch Schichtung verschiedener Materialien entstandene Außenräume oder durch Wellenleiter verursachte Inhomogenitäten. Für eine große Klasse solcher Probleme werden neue allgemeine theoretische und algorithmische Konzepte entwickelt.

Da Wellengleichungen im allgemeinen sowohl auslaufende als auch einlaufende Lösungen besitzen, während in der Natur nur auslaufende Wellen vorkommen, muß eine sogenannte Ausstrahlungsbedingung in das mathematische Modell aufgenommen werden, die die Eindeutigkeit der Lösung sicherstellt. Eine solche Bedingung ist die sogenannte Polbedingung, die bereits seit einigen Jahren für verschiedene Problemklassen untersucht wurde, z.B. für die zeitabhängige Schrödingergleichung in einer Raumdimension oder für die one-way Helmholtz-Gleichungen verschiedener Ordnung. Sie besagt, daß die Lösung einer Differentialgleichung ausstrahlend ist, wenn die Laplace-Transformierte bezüglich einer Abstandsvariable in der unteren komplexen Halbebene keinen Pol besitzt. Wir haben

gezeigt, daß diese Bedingung für Helmholtz-Gleichungen mit abstandsabhängigen Potential in beliebigen Raumdimensionen äquivalent zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung ist, die sich seit langem als Standard etabliert hat. Da in der Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung die Wellenzahl explizit auftaucht, ist sie für viele wichtige Probleme in den Anwendungen, etwa bei Wellenleitern, bei Beugung an optischen Gittern oder bei Problemen der Unterwasserakustik, nicht verwendbar. Hier stellt die Polbedingung eine attraktive, einheitliche Alternative zu den gebräuchlichen, künstlich wirkenden Bedingungen dar, die über Reihendarstellungen formuliert werden.

Ein entscheidendes neues Resultat unserer Untersuchungen ist eine Darstellungsformel für Lösungen der Helmholtz-Gleichung mit abstandsabhängigem Potential, die sich aus der Polbedingung ergibt und eine Zerlegung in Moden benutzt. Aus dieser Formel folgen asymptotische Entwicklungen des Fernfeldes, die Teile der bekannten Sätze von WILCOX und KARP verallgemeinern. Da die unbekannt Funktionen in der Darstellungsformel Differentialgleichungen, bzw. Volterrasche Integralgleichungen erfüllen, kann die Darstellungsformel auch für numerische Berechnungen verwendet werden. Da wir keine Greensche Funktion benutzen, ist unsere Methode im Gegensatz zum Randintegralgleichungsverfahren auch für Probleme verwendbar, bei denen eine Greensche Funktion nicht explizit bekannt ist. Dies ist zum Beispiel bei Streuung an unendlichen oder halb-unendlichen Ebenen, bei Außenräumen mit Wellenleitern oder bei inhomogenen Außenräumen der Fall.

Als weitere Anwendung ergibt sich eine neue Interpretation des von Bérenger entwickelten *perfectly matched layer* (PML) Verfahrens. Durch eine Drehung in der komplexen Ebene werden einlaufende Wellen exponentiell verstärkt und können so näherungsweise durch eine homogene Dirichlet-Bedingung auf einem künstlichen Rand ausgeschlossen werden. Es konnten Konvergenzresultate von COLLINO/MONK (1998) und LASSAS/SOMMERSALO (1998) verallgemeinert werden.

Als Gegenstück zum PML-Verfahren wurde die sogenannten Spektralmethode entwickelt, die die Polbedingung, bzw. die Darstellungsformel im Laplaceraum implementiert. Es werden gleichzeitig die diskrete Innenraumlösung und die auf Strahlen Laplace-transformierte Außenraumlösung, die mittels Splinefunktionen dargestellt wird, berechnet. Durch die gleichzeitige Behandlung von Innen- und Außenraum konnten Stabilitätsprobleme bei früheren Ansätzen behoben werden. Erste numerische Experimente zeigen, daß die Spektralmethode in etwa ebenso effizient ist wie das PLM-Verfahren, aber zusätzlich unmittelbar das Fernfeld sowie eine leicht auswertbare vollständige Lösungsdarstellung im Außenraum liefert.

Maxwell-Eigenwertlöser für optische Wellenleiter

Bearbeitet von: F. Schmidt, L. Zschiedrich, P. Deuffhard, T. Friese

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Das Design von hochentwickelten Komponenten in der Integrierten Optik erfordert eine extrem genaue Berechnung der Eigenmoden von Wellenleitern und optischen Chips. Da die bisher verwendete Helmholtz-Approximation in diesen Bereichen nicht mehr ausreicht, wurde ein neues Verfahren entwickelt, dem die vollständigen Maxwellschen Gleichungen zugrunde liegen. Von Seite der Numerik erzwingen sehr dünne Schichten die Verwendung von Multi-Level Methoden zur schnellen Lösung dieser Mehr-Skalen-Probleme. Auf dem Markt verfügbare kommerzielle Produkte versagen unter diesen Vorgaben. Es wurde ein auf Kantenelement-Diskretisierung basierendes Verfahren mit optimaler Mehrgitterkomplexität entwickelt. Die besonderen Schwierigkeiten lagen hierbei im Fehlen eines natürlichen Energieminimierungsprinzips für die Maxwellschen Wellenleiterprobleme und dem Vorhandensein eines nicht-physikalischen Teilraums, der die Divergenzbedingung verletzt. Das erste Problem konnte durch eine implizite Beschreibung der Eigenmoden in Form einer Resonanzgleichung und die Verwendung einer Newton-artigen Iteration gelöst werden. Der unphysikalische Unter-raum wird mittels Helmholtz-Zerlegung abgespalten. Beispiele für erfolgreiche Anwendungen des Codes sind der in Abbildung 2.3 gezeigte Multi-Quantum-Well Laser, dessen physikalisches Verhalten durch extrem dünne Schichten bestimmt wird, und die Berechnung der entarteten Eigenmoden einer optischen Faser (Abbildung 2.4). Diese Algorithmen sollen Eingang in ein kommerzielles Produkt finden.



ABBILDUNG 2.3: Si-Submount mit einem Multi-Quantum-Well Laser auf der Basis des Materialsystems InGaAsP/InP (Osram OS)

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

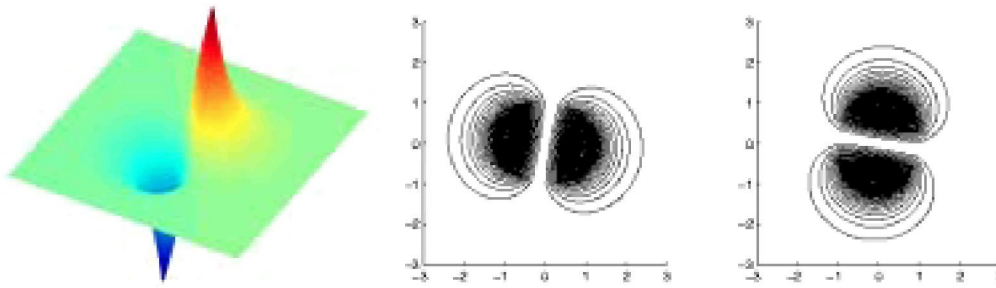


ABBILDUNG 2.4: Z-Komponente der magnetischen Felder der Grundmoden einer optischen Faser und Isolinien der zugehörigen transversalen Feldstärken.

Lineare Schrödingergleichung in zwei Raumdimensionen (L. Zschiedrich, F. Schmidt)

Es wurden die diskreten transparenten Randbedingungen für die Schrödingergleichung in zwei Raumdimensionen weiterentwickelt. Der theoretische Eckpunkt ist wiederum die Polbedingung, die abstrahlende Lösungen charakterisiert. Ein mit der Zeit linear anwachsender Speicher- und Rechenaufwand erfordert eine Verkürzung der Rekursion über die aufgetretenden Randwerte. Es konnten in dieser Hinsicht noch keine befriedigenden Resultate erzielt werden. Völlig alternativ wurde die oben erwähnte Spektralmethode auf die Schrödingergleichung erweitert, und eine spezielle PML-Methode unter Benutzung der semi-diskreten Außenraumbeschreibung entwickelt. In beiden Fällen bleiben Speicher- und der Rechenaufwand mit der Zeit konstant, und die Transparenz der Randbedingung kann beliebig genau realisiert werden.

Nichtlineare Schrödingergleichung (Th. Hohage, P. Deuffhard; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Werden starke Lichtimpulse durch Glasfaserkabel übertragen, so hängt die Polarisation nichtlinear von der elektrischen Feldstärke ab, und die Evolution der Amplitudenmodulationsfunktion wird durch die nichtlineare Schrödingergleichung beschrieben. Die Erfahrungen unseres Kooperationspartners an der Universität Dortmund (Arbeitsgruppe Prof. Voges, Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik) zeigen, daß die numerische Lösung dieser Gleichung mit Standard-Verfahren zuviel Zeit kostet und häufig unzuverlässig ist. In einem ersten Schritt haben wir den Grund für die Unzulänglichkeit der Standard-Verfahren analysiert und mit der Entwicklung von geeigneteren Verfahren begonnen.

Publikationen

- [1] D. Yevick, T. Friese, F. Schmidt: A Comparison of Transparent Boundary Conditions for the Fresnel Equation. Report 00-05, ZIB, 2000, submitted to J. Comp. Phys, accepted 2000.
- [2] F. Schmidt: Discrete Nonreflecting Boundary Conditions for the Helmholtz Equation Report 00-06, ZIB, 2000. Accepted for the Fifth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation – Waves 2000, Spain
- [3] F. Schmidt, T. Friese, L. Zschiedrich, P. Deuffhard: Adaptive Multigrid Methods for the Vectorial Maxwell Eigenvalue Problem for Optical Waveguide design. Erscheint in: Mathematik. Schlüsseltechnologie für die Zukunft, Springer-Verlag (2001).

2.2.3 Funktionenraumbasierte Optimierungsalgorithmen

Dieser Schwerpunkt hat sich aufbauend auf Vorarbeiten der vergangenen Jahre im Berichtszeitraum neu etabliert. Er eröffnet zugleich die Möglichkeit einer engeren Kooperation zwischen den Arbeitsgruppen Deuffhard und Grötschel.

Komplementaritätsmethode für Probleme der optimalen Steuerung

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard

Für Optimierungsprobleme, deren wesentliche Gleichungsnebenbedingungen gewöhnliche Differentialgleichungen sind, werden gegenwärtig direkte und indirekte Verfahren verwendet. Direkte Methoden reduzieren das Optimalsteuerungsproblem durch Diskretisierung auf ein nichtlineares Programm und verwenden Standardverfahren für endlichdimensionale Optimierungsprobleme zu dessen Lösung. Durch die frühzeitige Diskretisierung geht jedoch die Einbettung in den kontinuierlichen Kontext verloren. Indirekte Methoden transformieren das Problem mit Hilfe von PONTRJAGINS Maximumprinzip auf ein Mehrpunkt-Randwertproblem, welches dann mit Mehrziel- oder Kollokationsverfahren gelöst wird. Nachteilig hierbei ist die aufwendige Transformation, die analytische Vorarbeit und Einsicht in die Problemstruktur erfordert.

Im Berichtszeitraum wurde ein neuartiges Verfahren entwickelt [3], das wie direkte Methoden die KARUSH-KUHN-TUCKER-Charakterisierung der Lösung verwendet, diese jedoch im Funktionenraum ansetzt. Besonders schwierig ist dabei die Behandlung von Ungleichungsnebenbedingungen. Die den Innere-Punkte-Methoden verwandten Komplementaritätsmethoden definieren einen zentralen Pfad, dem bis zur Lösung gefolgt werden kann. Die Punkte auf dem Pfad sind dabei durch nichtlineare Gleichungen charakterisiert. Dies ermöglicht den Zugang mit Newton-artigen Fortsetzungsmethoden. Besonders vorteilhaft ist, daß

die Anwendung des Verfahrens praktisch kein Vorwissen über die Lösungsstruktur erfordert.

Dabei muß jedoch berücksichtigt werden, daß für stetige Differenzierbarkeit das Verfahren in L_∞ angesetzt werden muß, der Pfad aber nur in L_p , $p < \infty$, konvergiert.

Es wurde ein adaptiver Pfadverfolgungsalgorithmus für die Komplementaritätshomotopie im Funktionenraum entwickelt, dessen algorithmische Umsetzung ein inexaktes Newtonverfahren als Korrektor und einen inexakten tangentialen Prädiktor erfordert. Die Steuerung des Algorithmus erfolgt mittels einer problemangepaßten Norm, welche die spezielle Invarianzstruktur von Optimierungsproblemen berücksichtigt. Die Leistungsfähigkeit des Verfahrens konnte anhand eines schwierigen Problems der Luftfahrt gezeigt werden (Abbildung 2.5).

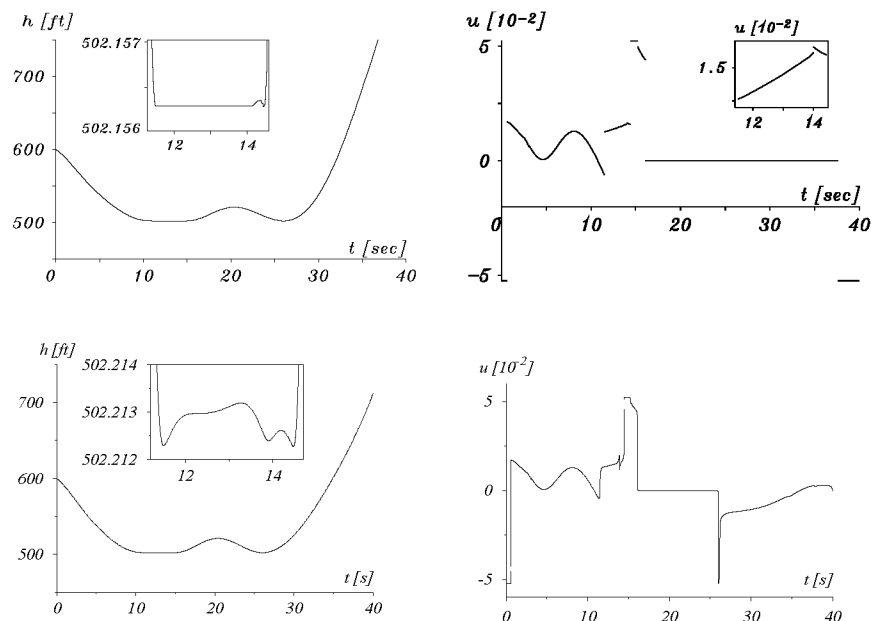


ABBILDUNG 2.5: Lösungen für das Landeabbruchmanöver beim Auftreten von Scherwinden. Oben: Lösung angegeben in [1]. Unten: Komplementaritätslösung bei Regularisierungsparameter $\mu = 2.1 \cdot 10^{-4}$ (man beachte die Skalenaufblähung). Links: Flughöhe über Grund. Rechts: Anstellwinkelrate (Steuerung). Für $t > 26$ s existiert ein Kontinuum von Lösungen, die Abweichungen sind daher nicht signifikant.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Optimierung von Therapieparametern in der Hyperthermie (Martin Weiser, Martin Seebaß, Peter Deuffhard; Kooperation: Peter Wust, Waldemar

Wlodarczyk, Roland Felix, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin; Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik und Klinik“)

Im Rahmen des Verlängerungsantrages für den Sonderforschungsbereich 273 wurden die konzeptionellen Grundlagen der numerischen Weiterentwicklung des Hyperthermieplanungssystems geschaffen. Die Möglichkeit der Perfusions- und Temperaturmessung im neuen kombinierten MR-Hyperthermiegerät kann durch die Identifizierung der Perfusion und eine schnelle Online-Nachoptimierung zur Verbesserung der Antennenansteuerung genutzt werden.

Von einem simultanen funktionenraumbasierten Ansatz zur Offline-Optimierung der Antennenparameter kann eine Effizienzsteigerung insbesondere bei wachsender Anzahl von Antennen erwartet werden. Die nichtlineare Wärmeleitungsgleichung wird dabei als Nebenbedingung zur Optimierung aufgefaßt.

Erweiterte Lagrange-SQP-Methoden

(Martin Weiser; Kooperation: Stefan Volkwein, Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich)

Für gleichungsbeschränkte Optimalsteuerungsprobleme konnte im Berichtszeitraum eine affin-invariante Norm für Optimierungsprobleme entwickelt und auf erweiterte Lagrange-SQP-Verfahren übertragen werden. Die inexakte Weiterentwicklung der Methode wurde erfolgreich zur Randsteuerung der Burgers-Gleichung eingesetzt [2].

Publikationen

- [1] R. Bulirsch, F. Montrone und H. J. Pesch, *Abort landing in the presence of windshear as a minimax optimal control problem. Part II: Necessary conditions*, J. Optim. Theory Appl. **70** (1991), 223–254.
- [2] S. Volkwein und M. Weiser, *Affine Invariant Convergence Analysis for Inexact Augmented Lagrangian-SQP Methods*, Report 00-56, ZIB, 2000.
- [3] M. Weiser, *Function Space Complementarity Methods for Optimal Control Problems*, Vorarbeiten zu einer Dissertation, FU Berlin (Dissertation eingereicht Februar 2001).

2.2.4 Prozeßsimulation

Im Rahmen dieses Schwerpunktes wird typischerweise die in der Abteilung Wissenschaftliche Software entwickelte numerische Software zur Lösung technologisch relevanter Prozesse eingesetzt. Häufig besitzen die interessanten, schwierigen Anwendungsprobleme besondere Eigenschaften, die eine Simulation mit einem Stan-

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. Ein weiterer Aspekt der Arbeit ist die Unterstützung der Anwender bei einer geeigneten Modellierung der zu simulierenden Phänomene.

Weiterentwicklung von linear-impliziten Methoden

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch, Peter Deuffhard
Kooperationspartner: R.D. Russell (Simon Fraser University, Vancouver, B.C., Canada); W. Cao, (University of Texas, San Antonio, Texas, U.S.); W. Huang, (University of Kansas, Lawrence, Kansas, U.S.); J.G. Verwer (CWI Amsterdam, Niederlande)

Das Berechnen von Strömungen um sich bewegende Körper ist eine sehr komplizierte Aufgabenstellung, die das Lösen von partiellen differentiell-algebraischen Gleichungen mit zeitabhängigen Rändern erfordert. Anwendungsgebiete derartiger Probleme reichen z.B. von der Simulation der Start- und Landephase eines Flugzeuges, des Verbrennungsmotors bis hin zum Studium der Ader- und Venenkontraktion im menschlichen Körper. Häufig führt ein einfaches explizites Nachführen der Ränder in der Zeit zu erheblichen Schrittweitereinschränkungen bei den dynamischen Rechnungen. Aufgrund der hohen Steifheit in partiellen Differentialgleichungen ist im allgemeinen eine implizite Diskretisierung der Randbewegung notwendig.

Der Arbeitsgruppe gelang es, im Berichtszeitraum eine effiziente linear-implizite Methode zu entwickeln, die neben der impliziten Berücksichtigung der zeitabhängigen Gebietsränder gleichzeitig die Genauigkeit der numerischen Lösung voll adaptiv in Zeit und Raum kontrolliert (siehe Abbildung 2.6). Den Schlüssel dafür bildete die Erweiterung der in [5] analysierten Rosenbrock Verfahren auf differentiell-algebraische Systeme der Form

$$B(t, u)\partial_t u = F(t, u)$$

mit singulärem Operator B unter Einbeziehung von dynamischen Gittertechniken, die in den vergangenen Jahren in einer Kooperation mit RUSSELL, CAO und HUANG erfolgreich entwickelt werden konnten (siehe Jahresbericht 1999, Adaptive Multilevel FEM). Darüberhinaus gelang es in einer Kooperation mit VERWER ein besonders effizientes Rosenbrock Verfahren der Ordnung drei zu konstruieren [6], das sich besonders bei zeitabhängigen Rändern in praktischen Rechnungen bewährt.

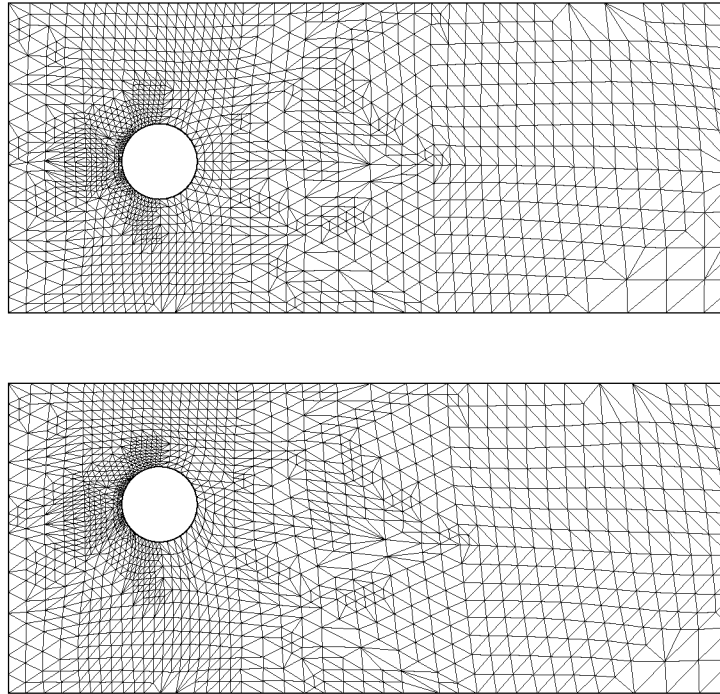


ABBILDUNG 2.6: Dynamische Gitteranpassung für eine zweidimensionale laminare Strömung um einen sich aufwärts bewegenden Zylinder.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Effiziente Simulation von Kombinationsreaktoren (Ulrich Nowak, Aleksander Grah, Jens Lang, Peter Deuffhard; Kooperationspartner: Roland Adler, Manfred Schreier, Thomas Hennig, Fachbereich Ingenieurwissenschaften, Universität Halle–Wittenberg; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Im Berichtszeitraum wurde die Entwicklung einer numerischen Simulations- und Optimierungsumgebung für den in Halle entwickelten speziellen Kombinationsreaktor weiter vorangetrieben. Im Mittelpunkt der Arbeiten stand die Modellierung und adäquate numerische Behandlung von räumlich zweidimensionalen Modellen für die wichtigsten Reaktormodule. Aufgrund der variablen Verschaltbarkeit der einzelnen Reaktormodule mußten entsprechend formulierte Kopplungsbedingungen abgeleitet und implementiert werden. Darüber hinaus erlauben sie eine voneinander unabhängige Wahl der örtlichen Diskretisierungsschrittweiten für die verwendete Linienmethode. Dadurch entstehen Systeme, deren Jacobimatrizen lokal stark irreguläre Besetzungsstrukturen aufweisen. Zur effizienten Integration derartiger Systeme wurde die iterative LIMEX-Variante an das Softwarepaket angebunden und mit einem speziellen Preprozessor versehen, der zur Erzeugung der

aktuellen Besetzungsstruktur und effizienten numerischen Differentiation dient.

Aerosolsimulation (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Jens Lang, Peter Deuffhard; Kooperationspartner: Oliver Ofenloch, Karlheinz Schaber, Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Universität Karlsruhe; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Innerhalb des letzten Jahres wurde die gesamte Modellierung aller bei Aerosolentstehung und -wachstum beteiligten Prozesse einer kritischen Revision unterzogen und neu formuliert. Alle Systemgleichungen können nun durch eine Transformation aus den klassischen Erhaltungsgleichungen abgeleitet werden. Weiterhin wurde die Modellierung auf Basis von Populationsbilanzen abgeschlossen.

Die revidierten Gleichungen wurden bereits für realistische Simulationen technischer Anlagen eingesetzt. Hierbei zeigte es sich, daß auch für extreme Temperaturdifferenzen zwischen Gas- und Flüssigphase die Modelle qualitativ und quantitativ richtige Prognosen liefern.

Um auch höherdimensionale Rechnungen mit Populationsbilanzen über mehrere Eigenschaftskordinaten durchführen zu können, wurde eine Implementierung der Gleichungen in dem Finite-Element Programm KARDOS durchgeführt. Da die Gleichungen stark konvektionsdominiert sind, werden anstelle der Standard-Galerkin Methode die stabileren Petrov-Galerkin Methoden verwendet. Hiermit lassen sich nun auch Phänomene wie Koagulation, Deposition und multimodale Verteilungen simulieren.

Simulation von mechanisch und thermisch beanspruchten Bauteilen (Rainer Schamel, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard; Kooperationspartner: Manfred Korzen, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Labor Brandingenieurwesen)

Im Rahmen eines Kooperationsvertrages mit der BAM wurden die Arbeiten zur Simulation von mechanisch und thermisch beanspruchten Bauteilen aufgenommen. Das Labor Brandingenieurwesen der BAM bewertet das brandschutztechnische Verhalten von Bauteilkonstruktionen. Im Rahmen der Qualitätssicherung bei Prüfung und Zertifizierung sollen Modellbildung und numerische Simulation die Güte der Prüfungsergebnisse verifizieren beziehungsweise erhöhen.

In Erweiterung eines bereits abgeschlossenen gemeinsamen Projekts soll nun die Verschiebung der Bauteile im Zug-Druck-Versuch, unter Berücksichtigung eines vorgegebenen Temperaturfelds, modelliert und simuliert werden. Im Berichtszeitraum wurde ein nichtlineares viskoelastisch-plastisches Materialmodell für einen geometrische linearen Dehnstab entwickelt und untersucht. Zur Simulation und Sensitivitätsanalyse des dabei entstehenden Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen wurde das Verfahren LIMEX eingesetzt.

Gravity-Kooperation (Rainald Ehrig, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard; Kooperationspartner: Karl Hans Neumayer, Peter Schwintzer, GeoForschungsZentrum

Potsdam)

Im Rahmen eines Forschungs- und Entwicklungsvertrages mit dem GeoForschungsZentrum Potsdam wurden die Arbeiten zur Bestimmung von Schwerefeldparametern in sehr großen Modellen des Erdgravitationsfelds abgeschlossen. Begonnen wurde mit einer vergleichenden Studie von Integrationsverfahren zur hochgenauen Bestimmung von Satellitenbahnen. In einem ersten Schritt wurden je ein gängiges Verfahren vom Runge-Kutta-Typ (DOP853), Mehrschritttyp (LSODE-Adams) und Extrapolationstyp (ODEX) ausgewählt und einem ersten, einfachen Test (ungestörte Bahnintegration) unterzogen. Alle Verfahren besitzen eine automatische Schrittweitensteuerung, um den geschätzten lokalen Fehler unter einer vorgegebenen Schranke zu halten. Für die zur Zeit in der Praxis benötigten Genauigkeiten von ca. 10-12 korrekten Dezimalstellen (Mission CHAMP), benötigen die untersuchten Verfahren einen vergleichbaren Aufwand, mit leichten Vorteilen für das Extrapolationsverfahren. Bereits in naher Zukunft (Mission GRACE) werden die Genauigkeitsanforderungen jedoch weiter steigen. Hier zeigt das Extrapolationsverfahren deutliche Aufwandsvorteile.

Da die wahre erzielte Genauigkeit, abhängig von der Kondition des Problems und dem verwendeten Verfahren, deutlich schlechter als die vorgegebene lokale Toleranzschranke sein kann, wurde mit der Entwicklung eines effizienten globalen Fehlerschätzers für ein Extrapolationsverfahren (DIFEX) begonnen. Erste Tests, auch an sehr anspruchsvollen Problemen, zeigen vielversprechende Resultate.

Algebraische Methoden in der Chemie (Karin Gatermann, Britta Broser; Kooperationspartner: Matthias Wolfrum, WIAS Berlin; Markus Eiswirth, Fritz-Haber-Institut; Elmar Vogt, FU Berlin)

Im Rahmen mehrerer Projekte wurden algebraische Methoden für die Analyse von Differentialgleichungen eingesetzt. Bei der Untersuchung von chemischen Reaktionssystemen (Massenwirkungskinetik) ließ sich der Ansatz mit torischen Varietäten weiter ausbauen. Der Ansatz von Clarke konnte verstanden werden als Verwendung von deformierten torischen Varietäten [3] und konnte folglich zur genauen Analyse des Problems in einem neuen Koordinatensystem benutzt werden. Als zentrales Ergebnis wurde gezeigt, daß sich die Struktur von positiven Lösungen von dünnbesetzten Gleichungssystemen auf die Struktur von stabilen stationären Lösungen von polynomiellen Differentialgleichungen verallgemeinern läßt. In einem zweiten Projekt werden die Liapunov-Schmidt Reduktion mit Symmetrie und die Reduktion auf Zentrumsmannigfaltigkeit mit Symmetrie mit Hilfe von SAGBI-Basen untersucht [4]. Wegen der Hervorhebung von Leitmonomen sind die SAGBI-Basen besser zur Verbindung mit Numerik und Analysis geeignet als andere Basen des Invariantenringes. Eine Implementation der SAGBI-Basen in Singular ist in Arbeit. Außerdem wurde weiter daran gearbeitet, die chaotische Bewegung eines elastomagnetischen Bandes in einem Magnetfeld mit Hilfe von Zeitreihenanalyse [1] und Conley-Index-Theorie zu untersuchen.

Publikationen

- [1] B. Broser: *Zeitreihenanalyse und Chaos*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, in Vorbereitung.
- [2] R. Ehrig, U. Nowak: *Algorithmen- und Softwareoptimierung für die Satellitenbahn- und Schwerefeldmodellierung*, Report 00-01, ZIB, 2000.
- [3] K. Gatermann: *Counting stable solutions of sparse polynomial systems in chemistry*, Konrad-Zuse-Zentrum, Report 00-32, ZIB, 2000.
- [4] K. Gatermann: *Application of SAGBI-bases to dynamics*, in Vorbereitung.
- [5] J. Lang: *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 16, Springer Verlag, 2000.
- [6] J. Lang, J.G. Verwer: *Ros3p – an accurate third-order Rosenbrock solver designed for parabolic problems*, Report MAS-R0013, CWI Amsterdam, eingereicht bei BIT.

2.2.5 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.

Einen zweiten, jüngeren Schwerpunkt bildete 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.

In einem weiteren Projekt mit medizinischer Ausrichtung wurden für ein neuartiges *Lichtring-Endoskop* Bildverarbeitungs-Algorithmen entwickelt, die eine quantitative Vermessung von Bronchialstrukturen ermöglichen.

Segmentierung dreidimensionaler biomedizinischer Bilddaten

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

Kooperationspartner: Johanna Gellermann, Peter Wust, Roland Felix (Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

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

Zur Extraktion von Gefäßbäumen aus 3D-Bilddaten wurde ein Verfahren ent-

wickelt, das aus einer schwellwertbasierten oder interaktiven Vorsegmentierung der von den Gefäßen eingenommenen Volumina die Zentralachse (medial axis) extrahiert. Voraussetzung für das Verfahren sind Bilddaten, in denen die Blutgefäße gut zu erkennen sind, zum Beispiel CT- oder MR-Angiographien. Die Vorsegmentierung gelingt insbesondere bei angiographischen Bilddaten mit Kontrastmittelapplikation, wenn zusätzlich Filter der digitalen Bildverarbeitung angewandt werden, z.B. zur Rauschminderung bzw. Glättung. Aus der so gewonnenen binarisierten Volumendarstellung wird dann automatisch das Mittellinien-Skelett extrahiert (Abbildung 2.7).



ABBILDUNG 2.7: Volumetrisches Oberflächenmodell der Blutgefäße und der Nieren (links). Mittellinien-Skelett des Gefäßbaumes rekonstruiert aus vorsegmentierten Daten (rechts). Es liegen MR-angiographische Daten zu Grunde.

In vielen Fällen haben dreidimensionale medizinische Bilddatensätze in einer oder mehreren Raumrichtungen eine schlechte Auflösung. Dies führt dazu, daß die Segmentierung dieser Daten zu grobe oder stufige Oberflächenmodelle liefert, die mit der Realität offensichtlich nicht übereinstimmen. Ziel einer Untersuchung war es, die fehlende Information unter plausiblen Annahmen (Glattheit, Fehlen von scharfen Kanten) zu rekonstruieren. Ein erfolgreiches Verfahren ist die “Variational Implicit Function”-Interpolation. Hierbei wird die Krümmung der Isofläche einer Funktion $f : R^3 \rightarrow R$ minimiert, wobei der Wert der Funktion an verschiedenen Stellen vorgegeben wird. Dies geschieht durch Segmentieren des Objektes in repräsentativen Schnittebenen mit beliebigen räumlichen Orientierungen und anschließender Berechnung der zugehörigen Konturen. Die Fläche $f = 0$ stellt dann die gesuchte Oberfläche dar (Abbildung 2.8).

Untersuchungen zur optimalen Frequenz für die regionale Hyperthermie

Bearbeitet von: Rudolf Beck, Martin Seebaß, Peter Deuffhard

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

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

Im Berichtszeitraum wurde in einer Simulationsstudie [5] untersucht, ob für die



ABBILDUNG 2.8: Segmentierte Schichten eines Bilddatensatzes von einem Oberschenkelknochen. Dargestellt sind die resultierenden Konturen sowie (transparent) die interpolierte Knochenoberfläche $f = 0$.

regionale Hyperthermie bessere Ergebnisse zu erwarten sind, wenn man die Betriebsfrequenz auf 150 bis 200 MHz an Stelle der bisher verwendeten 100 MHz steigert. Des weiteren wurde untersucht, welches die optimale Zahl der Antennen ist und wie sie geometrisch angeordnet sein sollten. Dabei wurden Optimierungen der Leistungsverteilung mit denen der Temperaturverteilung verglichen. Im ersten Fall wurde als Zielfunktion der Quotient aus Leistung im Tumor und Leistung im gesunden Gewebe gewählt, im zweiten Fall war das eher an der klinischen Praxis orientierte Ziel eine größtmögliche Erwärmung des Tumors bei vorgegebener Maximaltemperatur im gesunden Gewebe.

Als zusätzliches Bewertungskriterium wurde die Sensitivität der optimierten Temperaturverteilungen analysiert; einerseits bezüglich inexakter Generator-Einstellgrößen (Amplituden und Phasen) und andererseits bezüglich der Fehler in der Patientenpositionierung.

Wesentliche Ergebnisse der Studie sind:

- Für die Optimierung der Leistungsverteilung ist es günstig, möglichst viele unabhängig steuerbare Antennen in einem Antennenring anzuordnen. Dagegen ist es für die Temperaturoptimierung wichtiger, die Antennen auf mehrere Ringe zu verteilen und dadurch die Leistungsverteilung dreidimensional steuern zu können. Dies läßt sich dadurch erklären, daß die Zielfunktion für die Leistungsoptimierung insbesondere die *konstruktive* Interferenz der Antennenfelder im Tumor betont und weitgehend unsensibel gegenüber „Hot Spots“ im gesunden Gewebe ist. Dagegen gehen diese in die Temperaturoptimierung ein, so daß hier die Möglichkeit, *destruktive* Interferenzen auch außerhalb der Zentralebene des Tumors erzeugen zu können, höher bewertet wird.
- Mit steigender Antennenzahl wächst die optimale Frequenz; die besten Er-

gebnisse werden mit drei Ringen von je zwölf Antennen bei 150 oder 200 MHz erzielt.

- Die Sensitivität gegenüber Amplituden- und Phasenfehlern ist besonders groß bei Konfigurationen, die acht oder zwölf unabhängig steuerbare Antennen in einem Ring enthalten. Deshalb ist es fraglich, ob in der Praxis noch ein Gewinn zu erzielen ist, wenn man mehr als sechs bis acht unabhängig steuerbare Kanäle in einem Ring anordnet.
- Die Sensitivität gegenüber Amplituden- und Phasenfehlern sinkt bei steigender Frequenz, während gleichzeitig diejenige gegenüber Positionierungsfehlern wächst. Berücksichtigt man neben den Optimierungsergebnissen auch die Sensitivitäten, so ergibt sich eine optimale Frequenz im Bereich von 150 MHz. Eine solche Frequenz bietet – verglichen mit 100 MHz – weitere Vorteile, wenn das Hyperthermiegerät mit einem Magnetresonanztomographen zur nichtinvasiven Temperaturmessung kombiniert werden soll [1].

Antennenentwicklung für die Hyperthermie

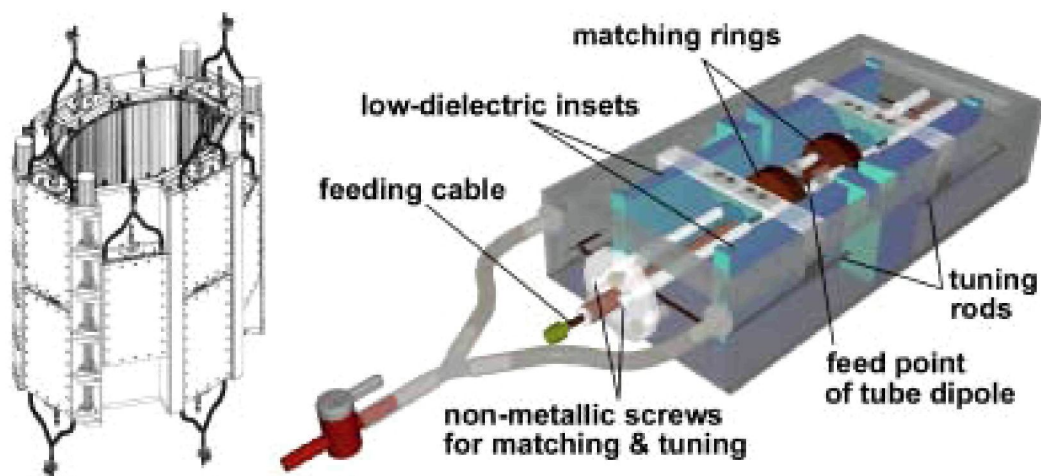


ABBILDUNG 2.9: Auszüge aus der AutoCAD-Dokumentation: Die gegenwärtige Anordnung der 12 WACO-Module im Test-Applikator mit einem Beladungsphantom mit elliptischen Querschnitt (links), ein Einzelmodul nach dem WACO-Prinzip (rechts). Zwischen dem Applikatorgehäuse und dem Phantom entsteht ein Zwischenraum, der mit deionisiertem Wasser gefüllt wird (Wasserbolus).

Bearbeitet von: Jacek Nadobny, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Lothar Westhoff, Waldemar Wlodarczyk, Peter Wust, Roland Felix (Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin); Gerhard Mönich

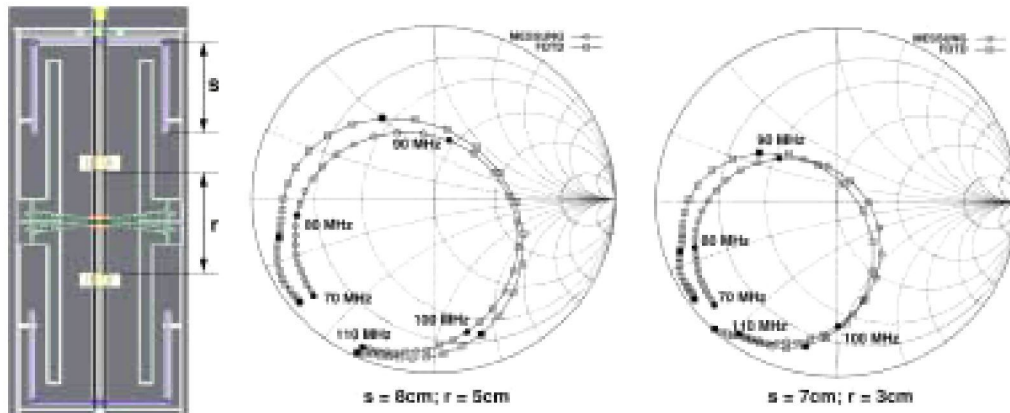


ABBILDUNG 2.10: Smith-Diagramm-Darstellungen der simulierten und gemessenen Frequenzgänge des Eigenreflexionsfaktors s_{11} eines WACOA-Moduls (links) bei zwei ausgewählten Einstellungen der Abtaststäbe s und Anpaßringe r : $s=80$ mm und $r=50$ mm, schlechte Anpassung (mitte) und $s=70$ mm und $r=30$ mm, gute Anpassung bei ca. 93 MHz (rechts).

(Fachbereich Elektrotechnik, TU Berlin); Werner Hoffmann, Herbert Rinneberg (Physikalisch-Technische Bundesanstalt)

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

Wie bereits im Jahresbericht 1999 dargestellt, wurde ein Prototyp eines modularen Hyperthermie (HT)-Applikators mit sogenannten Wasser-Erker-Antennen entwickelt. Dieser stellt den ersten Schritt zu einem Hybridsystem dar, in welches ein Hyperthermiegerät sowie ein Magnetresonanz (MR)-Tomograph zum on-line-Monitoring der Temperaturverteilung integriert werden sollen. Im Berichtszeitraum wurden die Antennen mit numerischer Unterstützung weiterentwickelt und meßtechnisch charakterisiert [7, 3, 4]. Als Ergebnis stehen nun die flexibel einstellbaren „WACOA“ (WATER-Coated-Antenna)-Module zur Verfügung (Abbildung 2.9). Ein WACOA-Modul ist ca. 29 cm lang und besteht aus einem mittig gespeisten Rohrdipol, der in einer wassergefüllten Kassette mit speziell geformten niederdielektrischen Einsätzen platziert ist. Der Rohrdipol ist mit verschiebbaren Stäben und Ringen verbunden, die eine Abstimmung und Anpassung in einem breiten Frequenzbereich von ca. 20 MHz ermöglichen. Einige Einstellungen sind in Abbildung 2.10 gezeigt. Diese Flexibilität ist nötig, um bei unterschiedlicher Verkopplung der Antennen und Beladungsschwankungen die Anpassung zu gewährleisten. Die insgesamt 12 WACOA-Module sind in drei Ringen angeordnet, von denen der mittlere polar verschoben ist (Abbildung 2.9, links). Dadurch ergeben sich eine bessere Belegung der Manteloberfläche mit Strahlern, eine geringere Verkopplung zwischen den Kanälen und eine einfache und gerade Ka-

belführung von der Stirnseite der Module aus. Die Beschaltung ist durchgehend in Koaxialtechnik ausgeführt und damit netzwerktechnisch einwandfrei analysierbar. Dies ist ein Vorteil gegenüber dem SIGMA-EYE-Applikator, dessen komplizierte Beschaltung die Steuerbarkeit erschwert [8]. Ein Antennenring mit vier WACOA-Modulen wurde in einem 3T-MR-Tomographen vermessen. Damit wurde der experimentelle Nachweis einer Temperaturerhöhung und der prinzipiellen 2D-Steuerbarkeit in einem MR-Tomographen erbracht.

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

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Evgeny Gladilin, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Klinik und Poliklinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie der TU München, Klinikum rechts der Isar)

Nach Projektstart im 4. Quartal des letzten Berichtszeitraumes konnte bereits in kurzer Zeit gezeigt werden, daß eine chirurgische Planung an 3D-Patientenmodellen unter Berücksichtigung der Weichgewebedeformation prinzipiell möglich ist [9]. Im aktuellen Berichtszeitraum wurden daraufhin Konzepte erstellt, wie die chirurgische Planung optimal unterstützt werden kann, und es wurden Verfahren entwickelt, mit denen erste Planungsschritte vereinfacht bzw. beschleunigt werden können. Dabei wurde die Kooperation mit den Münchener Ärzten stark intensiviert und eine Videokonferenzstrecke etabliert, die eine netzverteilte kollektive Planung ermöglicht [10].

Die Planung zeichnet sich dadurch aus, daß chirurgische Knochenumstellungen direkt am 3D-Modell vorgenommen werden können. Teile des Modells lassen sich nach chirurgischen Vorgaben separieren und mit direkter visueller Rückkopplung umpositionieren [11]. Nach erfolgter Umstellungsplanung werden die Verschiebungsvektoren zu den repositionierten Teilen auf ein Tetraedergittermodell appliziert, um eine numerische Weichgewebesimulation vornehmen zu können. Auf diese Art lassen sich am patientenspezifischen Gittermodell unterschiedliche Vorgehensweisen schnell planen und anhand der prognostizierten Weichgewebeanordnung bewerten (Abbildung 2.11).

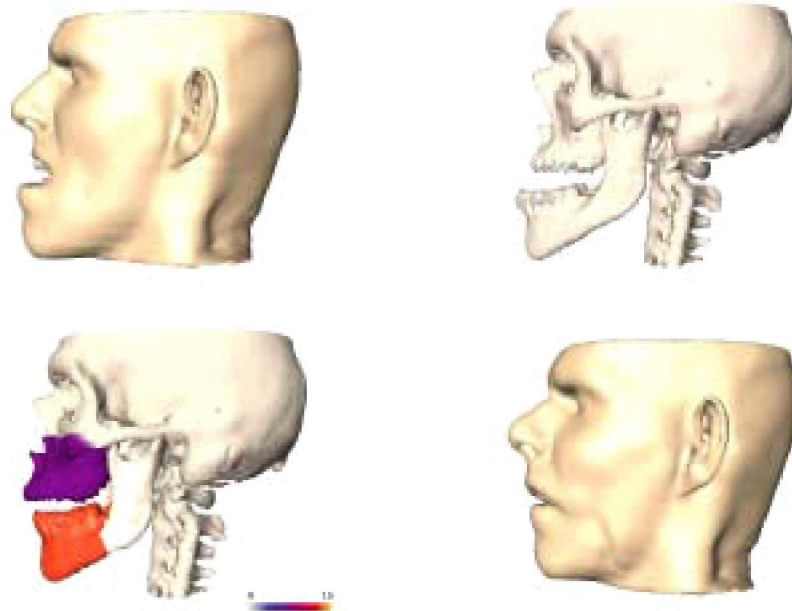


ABBILDUNG 2.11: 3D-Planung einer bimaxillären Osteotomie: (oben) präoperative Situation, (unten links) Planung einer hohen Le Fort I-Osteotomie nach Bell sowie einer sagittalen Spaltung nach Obwegeser-Dal Pont, (unten rechts) prognostizierte Weichgewebeanordnung. (Daten mit freundlicher Genehmigung von Dr. Dr. Zeilhofer und Dr. Dr. Sader)

Die Schwerpunkte der Untersuchungen im Berichtszeitraum lagen auf

- der Abschätzung des numerischen Fehlers bei der Berechnung der Deformationen von nahezu inkompressiblen Materialien,
- der Abschätzung des Linearisierungsfehlers bei der Berechnung “großer” Deformationen sowie
- der Erweiterung des biomechanischen Modells zur Berücksichtigung anisotroper Materialien.

Zunächst wurde die Eignung des gewählten Modellierungsansatzes (Auflösung nach Verschiebungen, Lamé-Navier PDG) zur Berechnung von Deformationen nahezu inkompressibler Materialien überprüft. Dazu wurden für vereinfachte Probleme die Ergebnisse der numerischen Simulation mit bekannten analytischen Lösungen verglichen. Es zeigte sich, daß die Simulationsergebnisse, bis hin zur Inkompressibilitätsgrenze (Poissonzahl $\nu \in [0, 0.49]$), in einer hinreichend guten Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen stehen.

Für die Weichgewebesimulation wird derzeit ein linear elastisches Modell verwendet, das jedoch nur für "kleine Verschiebungen" eine brauchbare Näherung des realen Deformationsverhaltens darstellt. Die in der klinischen Praxis auftretenden Fälle gehen jedoch häufig über den Gültigkeitsbereich einer linearen Approximation hinaus. Durch die Abschätzung des Linearisierungsfehlers, z.B. mittels der maximalen Komponente des Verzerrungstensors, ist es möglich, eine optimale Schrittweite für die iterative Berechnung der Deformation bei vorgegebener Genauigkeit zu bestimmen [2].

Eine effiziente mechanische Simulation biologischer Gewebe erfordert Gitter mit variabler Auflösung. Regionen, in denen Knochentrennungen und -umstellungen geplant werden (Nerven, Foramina) bzw. in denen visuell bedeutsame Details enthalten sind (Augen, Lippen), müssen feiner aufgelöst werden als die restlichen Bereiche. Aus diesem Grund wurden entsprechende Werkzeuge zur interaktiven Festlegung und Erzeugung von Gittern mit variabler Auflösung bereitgestellt (Abbildung 2.12).

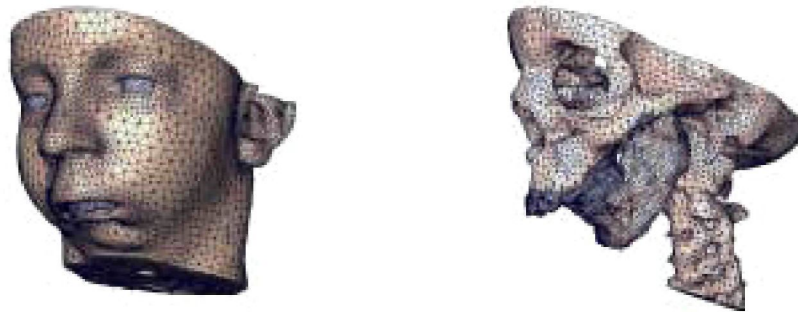


ABBILDUNG 2.12: Oberflächenmodell mit angepasster Auflösung zur Gittergenerierung

Die schnelle Berechnung der Weichgewebedeformation für große Gitter (200.000 – 500.000 Tetraeder) erfordert eine effiziente, numerische und programmtechnische Implementierung. Es wurde ein vollkommen überarbeiteter Programmcode zur Berechnung elastischer Deformationen auf Basis der FEM entwickelt, mit dem die Performanz der Berechnungen um bis zu einem Faktor 6 gesteigert werden konnte.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Lichtring-Endoskopie (Liviu Coconu, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege; Kooperation: Dr. Wolf Dörffel, Akademisches Lehrkrankenhaus Hennigsdorf)

Die Bronchoskopie ist ein etabliertes, wenig belastendes Verfahren zur Diagnose von Bronchial- und Lungenerkrankungen. Mit Hilfe eines Endoskops können

Veränderungen der Bronchialschleimhaut und des Lungengewebes erkannt werden. Ein Problem bei dieser Methode ist allerdings die quantitative Vermessung von Bronchialstrukturen, zum Beispiel von krankhaften Verengungen des Querschnitts. Aufgrund der stark verzerrenden Endoskop-Optik können Längen anhand der Kamerabilder nur grob geschätzt werden. Um hier Abhilfe zu schaffen, wurde an der Charité Berlin ein spezielles Lichtring-Endoskop entwickelt, bei dem Laserlicht über einen an der Endoskopspitze angebrachten konischen Spiegel auf die Bronchialwand projiziert wird. Anhand der Form des Lichtrings lassen sich Rückschlüsse über die Geometrie des Hohlraums ziehen.

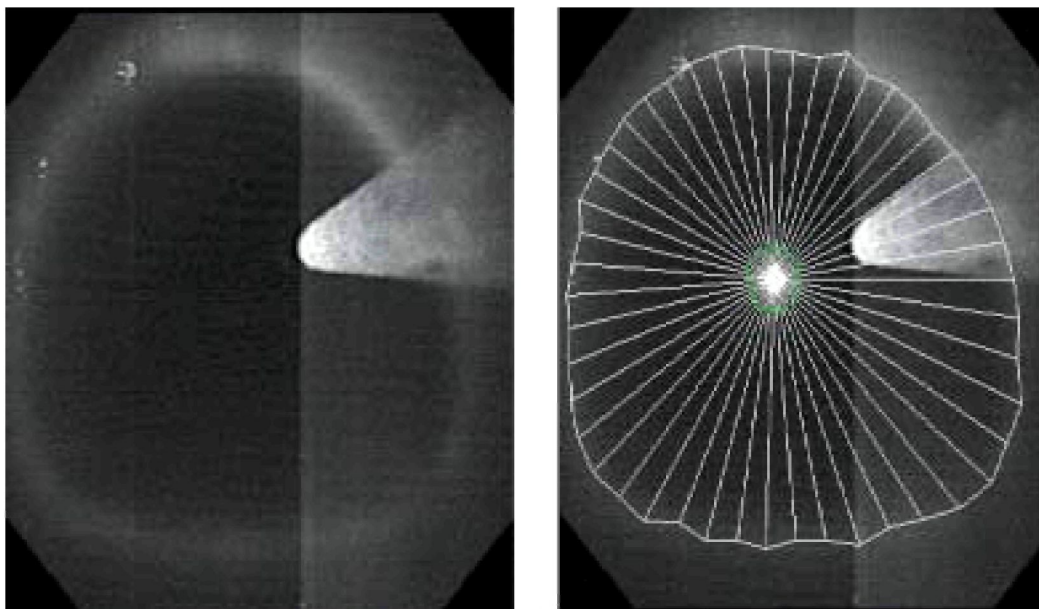


ABBILDUNG 2.13: Typisches Lichtring-Bild (links), Resultat der automatischen Bildsegmentierung (rechts).

In einem ersten Schritt wurden am ZIB Bildverarbeitungs-Algorithmen entwickelt, die eine automatische Segmentierung des Lichtrings ermöglichen. Als besonders geeignet hat sich dabei ein Ansatz herausgestellt, bei dem ausgehend von einem vorgegebenem Zentrum Strahlen verfolgt und deren Schnittpunkte mit dem Ring bestimmt werden. Spezielle Randbedingungen sowie Glättungstechniken garantieren, daß der Ring relativ zuverlässig und fast in Echtzeit detektiert werden kann (ca. 5-10 Bilder pro Sekunde). Anhand von im Vorfeld aufgenommenen Referenzbildern eines Rasters bekannter Größe kann die wirkliche Geometrie des Lichtrings bestimmt und ausgewertet werden. Gegenwärtig wird eine erste Version der Bildverarbeitungs-Software von Dr. Dörffel, dem Entwickler des Lichtring-Endoskops, im Krankenhaus Hennigsdorf getestet. Für die Zukunft ist geplant, das Verfahren weiter zu verbessern, vor allem in Bezug auf Robustheit und Präzision. Außerdem sollen Möglichkeiten gefunden werden, mit Hilfe des

Endoskops die dreidimensionale Gestalt von Hohlräumen zu rekonstruieren.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard, H.-C. Hege, M. Seebaß, *Progress Towards a Combined MRI/Hyperthermia System*, to appear in W.W. Grönemeyer (ed) Proc. Second Int. Congress HIGH CARE 2000, Bochum, 2000.
- [2] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard and H.-C. Hege: *Validation of a Linear Elastic Model for Soft Tissue Prediction in Craniofacial Surgery*. Accepted for SPIE Medical Imaging, San Diego, 2001
- [3] J. Nadobny, W. Wlodarczyk, W. Hoffmann, P. Wust: *Modular 3-D phased array applicator for regional hyperthermia*, Proc. Millennium Conference on Antennas & Propagation, AP 2000, European Space Agency (ESA), Davos, Switzerland, 9–14 April 2000, p. 486 (2000)
- [4] J. Nadobny, W. Wlodarczyk, W. Hoffmann, P. Wust: *Development of 3D-phased array applicator for deep body hyperthermia: FDTD modeling and experimental verification*, Proc. IEEE Antennas Propagat. Soc. Intern. Symposium, July 16–21, 2000, Salt Lake City, Utah, USA, 1072–1075 (2000)
- [5] M. Seebass, R. Beck, J. Gellermann, J. Nadobny, P. Wust, *Electromagnetic phased arrays for regional hyperthermia – optimal frequency and antenna arrangement*, Report 00-28, ZIB, 2000, Int.J.Hyperthermia, accepted for publication.
- [6] D. Stalling, M. Seebass, M. Zöckler and H.-C. Hege: *Hyperthermia Treatment Planning with HyperPlan – User’s Manual*. Report 00-27, ZIB, 2000.
- [7] W. Wlodarczyk, J. Nadobny, P. Wust, G. Moenich, P. Deuffhard, R. Felix: *Systematic design of antennas for cylindrical 3D phased array hyperthermia applicator*, Proc. IEEE Antennas Propagat. Soc. Intern. Symposium, July 11-16, 1999, Orlando, FL, USA, pp. 1004–1007 (1999)
- [8] P. Wust, R. Beck, J. Berger, H. Föhling, M. Seebass, W. Wlodarczyk, W. Hoffmann, J. Nadobny: *Electric field distributions in a phased-array applicator with 12 channels: Measurements and numerical simulations*. Med. Phys., pp. 2565–2579 (2000)
- [9] S. Zachow, E. Gladilin, H.-C. Hege and P. Deuffhard: *Finite-Element Simulation of Soft Tissue Deformation*. In: Lemke, H.U. et al (eds.): Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS), Elsevier Science B.V., pp. 23–28 (2000)

- [10] H.-F. Zeilhofer, S. Zachow, R. Sader und H.-C. Hege: *Virtuelle Realität in der MKG-Chirurgie*. Symposium 2000 München - Graz: Die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie zu Beginn des 21. Jahrhunderts - Rückblick und Ausblick, Fachtagung am Klinikum rechts der Isar der Technischen Universität München, 31.03.2000
- [11] H.-F. Zeilhofer, S. Zachow, J.D. Fairley, R. Sader, P. Deuffhard: *Treatment Planning and Simulation in Craniofacial Surgery with Virtual Reality Techniques*. Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery 28 (Suppl. 1), p. 82, 2000

2.2.6 Virtuelle Labore

Dieses Thema umfaßt die Entwicklung von integrierten Softwaresystemen zur Lösung spezifischer Probleme aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen wie Medizin, Biologie, Biochemie, Chemie und Physik. Die Erstellung solcher Arbeitsumgebungen wurde in der Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung in den vergangenen Jahren erfolgreich zu einem Arbeitsschwerpunkt entwickelt. Dabei hat sich gezeigt, dass die Verknüpfung moderner numerischer, geometrischer und bildverarbeitender Algorithmen mit leistungsfähigen Visualisierungsmethoden unter einer einfach bedienbaren Oberfläche prinzipiell neue Möglichkeiten eröffnet und für die Lösung komplexer Problemstellungen unabdingbar ist.

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

Das Programmsystem Amira [1] bildet die Grundlage für die Entwicklung aller virtuellen Labore am ZIB. Entsprechend wurde das System im Berichtszeitraum weiter ausgebaut und ergänzt. Amira ist konsequent objekt-orientiert gestaltet und vollständig modular aufgebaut [2]. Mittlerweile können über 25 verschiedene Datentypen wie 3D-Bilder, Finite-Elemente-Gitter oder hierarchische Dreiecksnetze mit mehr als 150 verschiedenen Modulen weiterverarbeitet bzw. dargestellt werden. Das System umfaßt zur Zeit insgesamt mehr als 500.000 Zeilen Programmcode. Der große Vorteil von Amira beruht dabei auf der Tatsache, daß diese Komplexität dem Anwender weitgehend verborgen bleibt. Ihm werden nur die für seine Problemstellung jeweils sinnvollen Optionen angeboten. Gleichzeitig hat er bei Bedarf aber vollen Zugriff auf alle Komponenten, beispielsweise durch Nutzung der mächtigen Amira-eigenen Skript-Schnittstelle.

Einen Meilenstein in der Entwicklung von Amira stellte die Fertigstellung einer Windows-Version im Frühjahr 2000 dar. Diese Version ermöglicht es erstmals, das Programm auf kostengünstigen PC-Plattformen einzusetzen und damit einen schlagartig vergrößerten Anwenderkreis zu bedienen. Technisch gesehen wurde

die Windows-Portierung mit Hilfe der plattform-unabhängigen Oberflächenbibliothek Qt realisiert, wodurch eine gemeinsame Code-Basis für alle Unix- und Windows-Versionen beibehalten werden konnte. Dies ist eine wesentliche Voraussetzung, um ein Projekt in dieser Größenordnung mit vertretbarem Aufwand weiterzuführen. In der zweiten Jahreshälfte wurde dann mit Amira 2.2 eine Entwicklungsversion fertiggestellt, die es auch externen Anwendern erlaubt, das Programm in einfacher Weise um eigene Module bzw. Import- und Export-Funktionen zu ergänzen.

Mit dem Ziel, eine solide und gut dokumentierte Softwarebasis für virtuelle Labore zu schaffen, ergaben sich naturgemäß eine Reihe von Aufgabenstellungen, die nicht unmittelbar wissenschaftlicher Natur sind. Um dieser Problematik gerecht zu werden, wurde bereits 1999 von ZIB-Mitarbeitern die Firma *Indeed - Visual Concepts GmbH* gegründet, die sich die Weiterentwicklung von Amira zu einem kommerziellen Produkt zur Aufgabe gemacht hat. Dabei wurde eine enge Kooperation mit dem ZIB vereinbart, so daß beide Seiten wechselseitig voneinander profitieren können. Die Vermarktung von Amira wird dabei nicht von Indeed selbst durchgeführt, sondern weltweit von dem Unternehmen *Template Graphics Software Inc. (TGS)*, San Diego (CA), übernommen. Nach anfänglich schwierigem Verlauf konnten im Jahr 2000 erste unternehmerische Erfolge erzielt werden, von denen auch das ZIB profitieren konnte. Der Schwerpunkt lag dabei auf dem Bereich 3D-Mikroskopie, wo die Fähigkeiten von Amira zur Bilddaten-Segmentierung und Geometrie-Rekonstruktion in idealer Weise genutzt werden können.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Malte Zöckler, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Randolf Menzel und Robert Brandt (AG Neurobiologie, 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 mit Hilfe bildgebender und computergestützter Verfahren.

Im Jahr 2000 ging die erste, dreijährige Förderperiode des Projektes zu Ende. Aufgrund der guten bisher erzielten Ergebnisse wurde einer Weiterförderung des

Verbundes zugestimmt.

In der ersten Förderperiode wurde die Anatomie von Insektengehirnen auf der Ebene größerer bekannter Neuropil-Strukturen untersucht. Werkzeuge zur Geometrierekonstruktion, zum Alignment und zur Quantifizierung anatomischer Variabilität wurden entwickelt und mit verschiedenen biologischen Fragestellungen getestet.

Im zweiten Teil des Projektes wird es drei Schwerpunkte geben: 1. Erweiterung der anatomischen Modelle auf die nächst-feinere Hierarchiestufe, 2. Entwicklung von Verfahren zur Integration funktioneller Daten und 3. Anwendung der entwickelten Methoden auf exemplarische biologische Fragestellungen, um diese Art der virtuellen Neuroanatomie als Standard zu etablieren.

Die Arbeiten zu Punkt 1 wurden bereits im Jahr 2000 begonnen. Nachdem nun geometrische Modelle der wichtigsten Strukturen des Fliegen- und Bienenhirns vorliegen, und gut bedienbare Werkzeuge vorhanden sind, um solche zu erstellen, sollen diese nun auf Einzelzellniveau verfeinert werden. Eine Aufgabe besteht in der Extraktion geometrischer Modelle von einzeln gefärbten Neuronen aus dreidimensionalen Bilddaten. Aufgrund der zum Teil sehr schwachen Kontraste und des starken Rauschens der Bilddaten im Bereich der feinsten Verzweigungen, liegt der Schwerpunkt der Entwicklungen hier auf interaktiven Verfahren, die jederzeit manuelle Eingriffe in die Geometrierekonstruktion erlauben (vgl. Abbildung 2.14).

Knochenanalyse

Bearbeitet von: Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Wolfgang Gowin, Dieter Felsenberg, Michael Giehl, Peter Saporin und Arndt Boshof (Osteoporoseforschungsgruppe, Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin); Jürgen Kurths und Alexei Zaikin (Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik an der Universität Potsdam); Lis Mosekilde und Jesper Skovhus Thomsen (Dept. of Cell Biology, Institute of Anatomy, University of Aarhus, Dänemark)

Förderung: European Space Agency (ESA) / European Space Research and Technology Center (ESTEC)

Osteoporose ist mit etwa 6 bis 8 Millionen Erkrankten als Volkskrankheit zu bezeichnen. Sie ist eine Erkrankung des gesamten Skeletts, charakterisiert durch eine Verringerung der Knochenmasse und Verschlechterung der Gewebsstruktur. Der Knochen verliert an Stabilität und Elastizität. Infolgedessen nimmt die Brüchigkeit des Knochens zu. In gleichem Maße steigt das Risiko, schon ohne entsprechenden Sturz o.ä., einen Knochenbruch zu erleiden. Bei Astronauten findet in der Schwerelosigkeit Knochenabbau statt, der mit Osteoporose zu vergleichen ist. Dies geschieht mit vielfach höherer Geschwindigkeit und stellt bei längeren Aufenthalten im All eine ernstzunehmende Gesundheitsgefahr da.

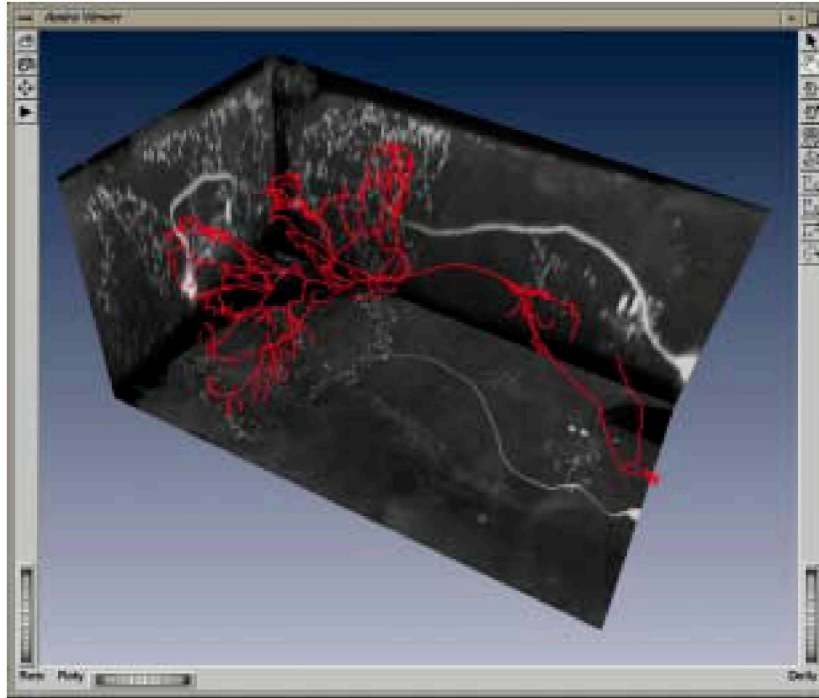


ABBILDUNG 2.14: Skelett eines Projektions-Neurons im Gehirn der Biene, welches vom Antennal-Lobus zum Pilzkörper verläuft. Die Bilddaten, aus denen das Modell extrahiert wurde sind als *Maximum-Intensity Projection* im Hintergrund dargestellt. Daten: AG Menzel, FU Berlin.

Die Gewebsstruktur des Knochens kann auf verschiedene Weise untersucht werden. Der traditionelle Weg ist die Anfertigung von histologischen Schnitten. Eine Methode, die den Knochen nicht zerstört, ist die Mikro-Computertomographie (Mikro-CT). Die erstellten Aufnahmen der Knochen können durch verschiedene Maße charakterisiert werden. Ziel des Projekts ist es, die nötigen Auswertungsschritte innerhalb eines virtuellen Labors zu unterstützen und weitere geeignete Knochenmaße zu entwickeln. Die Auswertungsumgebung soll für die Beobachtung der Knochenveränderungen bei Raumflügen genutzt werden.

Es wurde ein Überblick über in der Literatur verwendete Knochenmaße erstellt und damit begonnen, die wichtigsten von ihnen in AMIRA zu implementieren. Teilweise geschieht dies durch Neuentwicklung von Modulen, teilweise genügt es, mit der AMIRA-eigenen Skriptsprache vorhandene Module entsprechend anzusteuern. Nach langwierigen Verhandlungen begann im Dezember das Forschungsprojekt „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“. Innerhalb dieses Projektes werden Knochenproben als Mikro-CT-Aufnahmen und als histologische Schnitte in größerer Zahl zur Verfügung stehen. Anhand dieser Proben kann die Auswertungsumgebung getestet und weiterentwickelt werden. Bisher wurden die Projek-

partner in AMIRA eingeführt und bei der Installation von Computern unterstützt, die es ihnen ermöglichen in ihren Institutionen selbständig mit AMIRA zu arbeiten.

Virtuelles Molekül-Labor

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

Kooperationspartner: Forschungsverbund RiNA GmbH; AG Christof Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik)

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

Ein wesentlicher Schwerpunkt der Arbeit im Jahr 2000 lag auf der Verbesserung der praktischen Verwendbarkeit von Amira für die Visualisierung und Analyse von Molekülen. So erlaubt z.B. das Hinzufügen verschiedener Dateiformate dem Anwender, ein Molekül ohne vorherige Konvertierung zu untersuchen. Weitere Arbeiten wurden im Bereich der Selektion von Atomen bzw. Atomgruppen durchgeführt, wodurch bestimmte Bereiche des Moleküls hervorgehoben, andere ganz ausgeblendet werden können (Abbildung 2.15 *links*). Im Zusammenhang mit der Selektion wurde die Möglichkeit geschaffen, im Molekül Atomabstände und Winkel zwischen Atomen zu vermessen und diese Werte im Fall von Dynamiktrajektorien über alle Zeitschritte zu plotten.

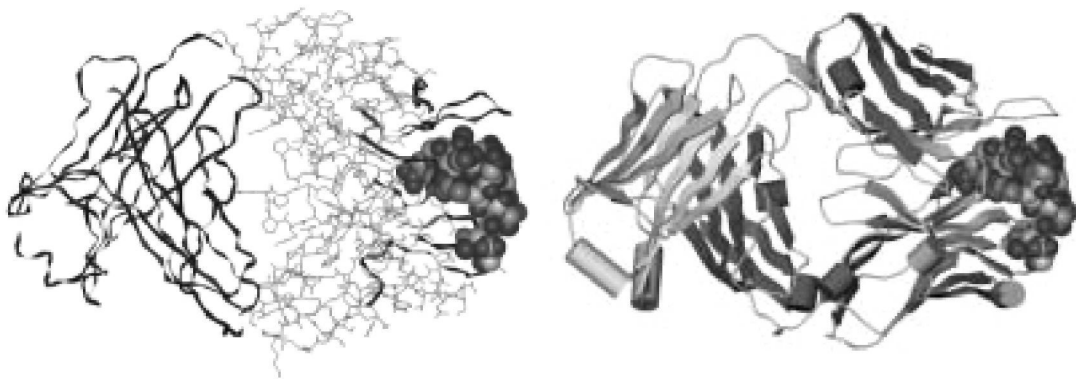


ABBILDUNG 2.15: Teil eines Antikörpers mit einem an der rechten Seite gebundenen Substrat. Das Substrat ist in beiden Darstellungen als Kalottenmodell gezeigt. *Links:* Das Bild verdeutlicht, wie unterschiedliche Bereiche des Moleküls in verschiedenen Darstellungen gezeigt werden können. *Rechts:* Sekundärstrukturen: β -Faltblätter, α -Helizes und Rückgrat.

VISUALISIERUNG GROSSER MOLEKÜLE. Um große Moleküle untersuchen zu können, ist es notwendig, schnell und flexibel auf die Bestandteile eines Moleküls zugreifen zu können. Dazu wurde eine Sprache definiert und implemen-

tiert, die es ermöglicht, logische Ausdrücke der Form `s/type=helix AND NOT (a=C OR a=N)` zu verwenden. In diesem Beispiel sind alle Atome gemeint, die zu einer Helix gehören, abgesehen von Kohlenstoff- und Stickstoffatomen. Diese Ausdrücke können sowohl von der Kommandozeile als auch in der Benutzeroberfläche verschiedener Module eingegeben werden. In den Basis-Visualisierungs-Modulen werden diese Ausdrücke verwendet, um Atome des Moleküls auszumaskieren. Ein weiteres neuentwickeltes Modul, das diese Funktionalität ausnutzt, zerlegt ein Molekül in seine Zusammenhangskomponenten oder andere frei definierbare Teile.

Insbesondere für große Moleküle ist es interessant, die Sekundärstrukturen, die oftmals in PDB-Dateien (Protein Data Base) enthalten sind, zu visualisieren. Ein neues Darstellungs-Modul erlaubt es nun, β -Faltblätter in Form von blattartigen Pfeilen, Helizes in Form von Zylindern, und das Rückgrat durch Schläuche darzustellen (Abbildung 2.15 *rechts*).

ALIGNMENT VON PSEUDOMOLEKÜLEN. Der Vergleich zweier Konformationen mit Hilfe eines Alignments ihrer Repräsentanten setzt einerseits die Existenz solcher Repräsentanten voraus und wird andererseits dem Problem nur im Falle relativ starrer Konformationen gerecht. Als Alternative wurde eine zweistufige Strategie implementiert. Zuerst wird jede Konformation durch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ihrer Atome dargestellt. Diese wird grob durch eine Menge gewichteter und typisierter Punkte approximiert. Die Typisierung kann dabei auf dem Atomtyp, der Partiaalladung oder den Donor-Akzeptor-Eigenschaften beruhen.

Im zweiten Schritt werden attraktive Kräfte zwischen Paaren von Punkten gleichen Typs aus beiden Mengen angenommen. Durch Relaxation unter Einschränkung auf eine globale starre Transformation, erhält man ein Alignment bei dem Bereiche gleicher Typisierung möglichst nah beieinander liegen. Dieses Vorgehen eignet sich nicht nur für die im ersten Schritt erzeugten Punktmengen, sondern auch für das Alignment einzelner Moleküle verschiedener Struktur, bei denen also keine natürliche Zuordnung von Atompaaren besteht.

ANBINDUNG DER NUMERISCHEN SOFTWARE. Über die Methoden zur Visualisierung der neu konzipierten metastabilen Konformationen hinaus (vgl. Abbildung 2.16 und Abschnitt 2.2.1) wurde ein Interface implementiert, um Monte-Carlo-Simulationen von Amira aus steuern zu können. Desweiteren wurden im Interesse von Synergieeffekten die grundlegenden objektorientierten Datenstrukturen für Moleküle zu einer von Amira unabhängigen Bibliothek zusammengefasst und können nun zur Entwicklung numerischer Algorithmen verwendet werden. Diese sind dann später leicht in Amira integrierbar.

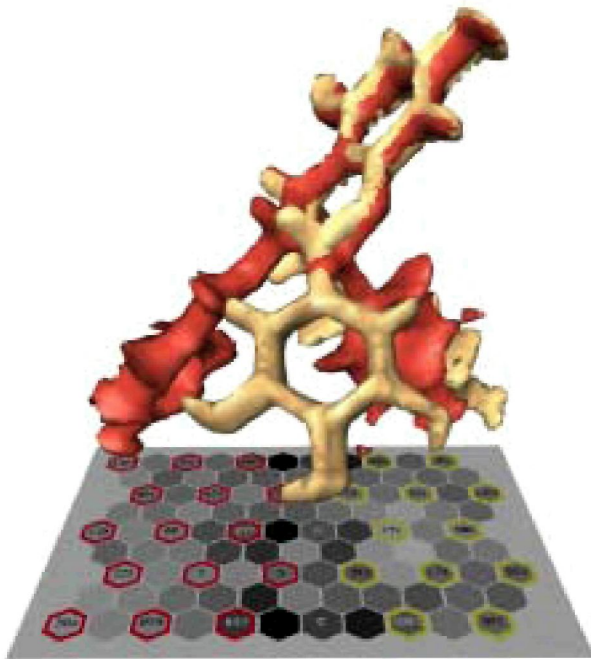


ABBILDUNG 2.16:
 Visualisierung der Konfigurationsdichten zweier Konformationen eines Katechinmoleküls durch zwei Isoflächen.
 Darunter: Darstellung des bei der Konformationsanalyse verwendeten neuronalen Netzes.

Virtuelles Astrophysik-Labor

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

Kooperationspartner: AG Ed Seidel, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm; AG Mike Norman, National Center for Supercomputing Applications (NCSA), Urbana-Champaign (Illinois, USA); John Shalf, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBL), Berkeley, San Francisco (Kalifornien, USA); Wai-Mo Suen, Washington University (WashU), St. Louis, USA; Stefan Heusler, Arts of Science, Köln

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft, BMBF/DFN

Um die verschiedensten auftretenden Daten- und Gittertypen mit möglichst wenig redundantem Code behandeln zu können, wird an einem Datenmodell in Anlehnung an das mathematische Konzept der Faserbündel gearbeitet. Dieses Datenkonzept entspricht in natürlicher Weise den differentialgeometrischen Formulierungen aus der allgemeinen Relativitätstheorie (siehe Abbildung 2.17), so daß durch diesen neuartigen Zugang eine Allgemeinheit und somit Wiederverwendbarkeit der entstehenden Strukturen erreicht werden kann, der gegenüber alternativen Ansätzen für ein allgemeines Datenmodell Vorteile erwarten läßt (siehe Abbildung 2.18). Neben Gittertypen wie z.B. Tetraedergittern, uniformen Gittern, triangulierten Flächen lassen sich in diesem Rahmen auch Beziehungen zwischen Gittern formulieren, sowohl zeitlich wie räumlich (z.B. Hierarchien), aber auch Methoden zur Generierung von Koordinaten aus Reihenentwicklungen

(Multipol- und Fourierentwicklungen, spektrale Methoden, Polynome).

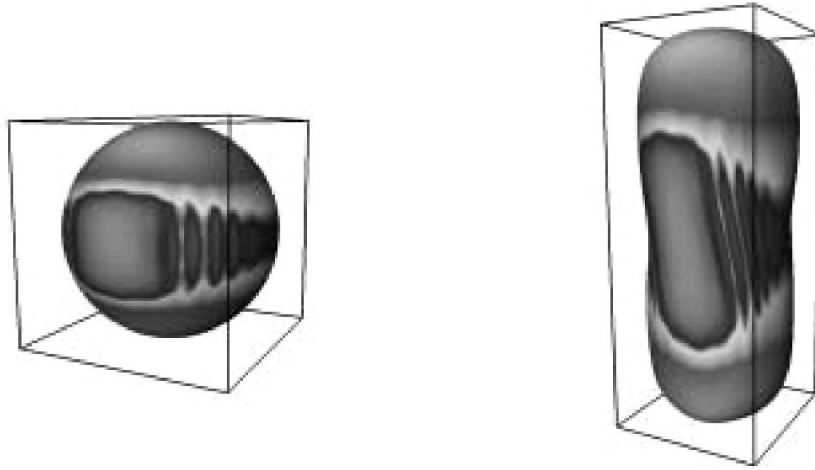


ABBILDUNG 2.17: Der Horizont eines Schwarzen Loches, mit sichtbar gemachter Krümmung, dargestellt in den für die Berechnung günstigsten Koordinaten und seiner wahren physikalischen Natur entsprechend (Einbettung).

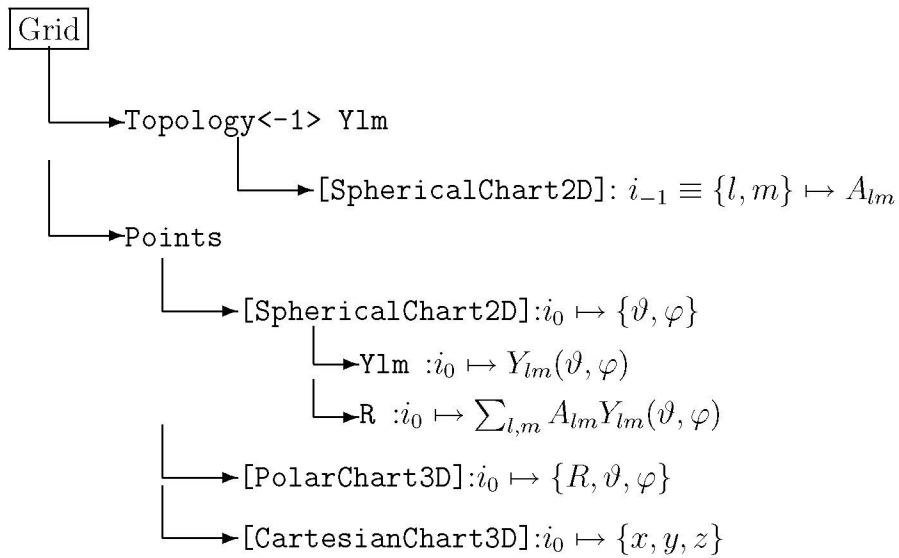


ABBILDUNG 2.18: Ein Beispiel für eine Formulierung einer durch Multipol-Momente definierten Fläche im Faserbündel-Modell mit der Darstellung ihrer erzeugenden Koeffizienten und ihrer Repräsentation in verschiedenen Karten.

Es ist abzusehen, daß der sonst problematische Widerspruch zwischen hohem Abstraktionsgrad und effizienter Implementierung durch Anwendung der neuen Methoden der C++ Template Metaprogrammierung² vermieden werden kann.

In dem Teil des Projektes, der sich mit der Visualisierung von adaptiv verfeinerten Gittern in der allgemeinen Relativitätstheorie beschäftigt, wurden zunächst die internen Datenmodelle grundlegend überarbeitet. Die hierarchische Struktur der Daten wird nun direkter repräsentiert, was einen deutlich effektiveren Datenzugriff ermöglicht.

Als weitere Folge dieser Überarbeitung kann nun bei zeitabhängigen Daten das Zwischenspeichern (caching) verschiedener Zeitschritte wesentlich einfacher erfolgen, und auch die von Anwendern gewünschte Verarbeitung zweidimensionaler Daten ist als Spezialfall bereits enthalten. Ferner besteht die Möglichkeit, Daten, die im hierarchisch organisierten Datenformat HDF5 gespeichert wurden, einzulesen.

Außerdem wurde damit fortgefahren, weitere Module des Visualisierungssystems AMIRA derart zu modifizieren, daß sie direkt auf den adaptiven Datenstrukturen operieren. Dabei sind insbesondere die Module für die Darstellung orthogonaler Schnitte und Höhenfelder zu nennen.

Ein weiterer Teil des Projektes beschäftigt sich damit, das Virtuelle Physiklabor über das Netz verfügbar zu machen. Im vom DFN geförderten TIKSL-Projekt wurden dazu grundlegende Techniken entwickelt, um Daten entfernter Applikationen im Labor zu betrachten, und die Applikation und deren Steuerung direkt in dieses einzubeziehen. Das inzwischen abgeschlossene Projekt erweiterte dazu die I/O Bibliothek HDF5 um Streamingfähigkeiten und die Visualisierungsumgebung AMIRA um die entsprechenden Reader-Module.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Rekonstruktion von Flächen aus Punktwolken (Oliver Sander, Daniel Runge)

Ziel dieses Projektes war die Entwicklung eines Algorithmus, der dreidimensionale Flächen anhand vorgegebener Sample-Punkte rekonstruieren kann. Dieses Problem tritt in einer Vielzahl von Situationen auf, insbesondere immer dann, wenn von realen Objekten Computermodelle erstellt werden sollen. Die dabei üblicherweise verwendeten Laser-Range-Scanner liefern im allgemeinen Punktwolken, die häufig außer ihrer geometrischen Position keine weiteren Informationen tragen.

In der Literatur existieren eine Vielzahl von Lösungsansätzen. Diese unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Bearbeitungsgeschwindigkeit und ihrer Robustheit gegenüber verrauschten Punktwolken.

Im Rahmen des Visualisierungssystems AMIRA wurde ein neuer Algorithmus im-

²<http://www.oonumerics.org/>

plementiert, der sich, bei guter Qualität der Resultate, insbesondere durch seine Geschwindigkeit auszeichnet. Die Idee basiert auf einem Konzept aus der Visualisierung von Molekülflächen. Es wird eine Probekugel simuliert, die auf der Punktwolke umherrollt. Jedes Punkttripler, das die Kugel auf ihrem Weg berührt, wird als Dreieck in die Oberfläche eingefügt (siehe Abbildung 2.19). Das Verfahren kann wahlweise mit einem fest eingestellten oder sich an die lokale Punktdichte adaptierenden Kugelradius betrieben werden. Der Algorithmus erreicht auch auf großen Modellen Geschwindigkeiten, die ein interaktives Arbeiten ermöglichen [7].

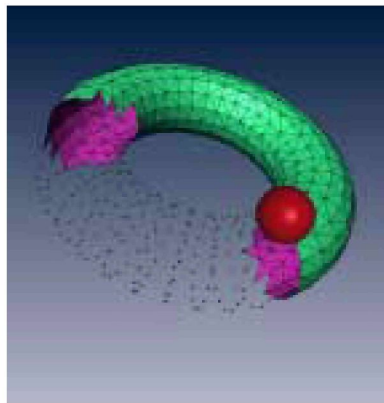


ABBILDUNG 2.19: Rekonstruktion einer Oberfläche aus einer Punktwolke durch Abrollen einer Probekugel.

Landschaftsplanung (Hans-Christian Hege, Detlev Stalling; Kooperation: Armin Werner und Philip Paar, Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF), Müncheberg; Oliver Deussen, Institut für Simulation und Graphik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg; Förderung: Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU))

Moderne Landschaftsplanung beschäftigt sich mit dem genauen Verstehen, der Vorhersage und gezielten Beeinflussung von Prozessen, die auf Landschaftselemente einwirken. Durch interaktive Visualisierung können in den unterschiedlichen Planungsstadien verschiedene Optionen schnell analysiert und bewertet werden. Ein entscheidendes Element der erfolgreichen Landschaftsgestaltung ist die korrekte Umsetzung von Planungsergebnissen. Dazu müssen den Betroffenen und den politischen Entscheidungsträgern die geplanten Veränderungen und deren Folgen verständlich gemacht werden. Im Gegensatz zur eigentlichen Planung, wo abstrakte Darstellungen wie etwa thematische Karten verwendet werden, sind für Laien realitätsnahe, interaktiv erfahrbare 3D-Visualisierungen besser geeignet. Es liegt daher nahe, ein 3D-Visualisierungssystem zu entwickeln, das es ermöglicht, realitätsnah dargestellte Landschaften interaktiv und mit räumlichem Sichtein-

druck zu durchwandern. So können die komplexen Beziehungen zwischen den vielfältigen Einflußfaktoren und den Landschaftselementen unmittelbar erfahrbar gemacht werden (siehe Abbildung 2.20).

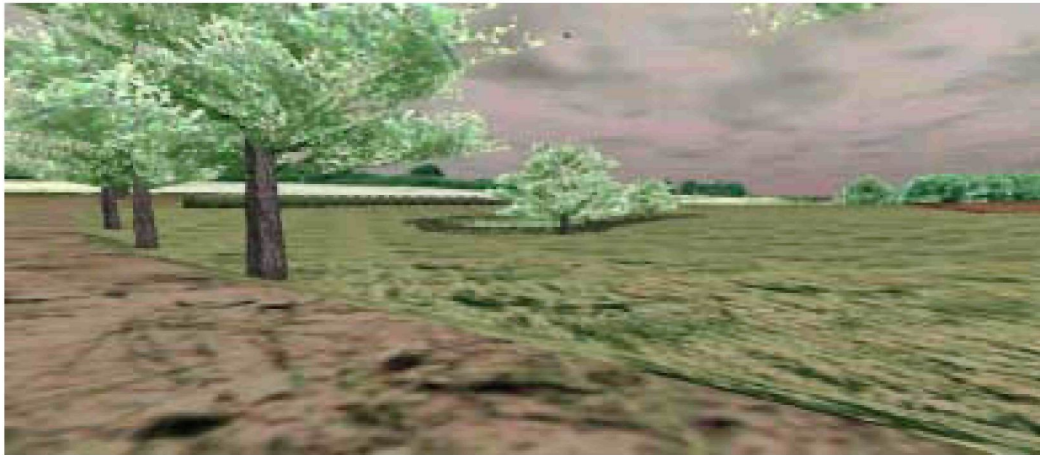


ABBILDUNG 2.20: Echtzeit-Visualisierung zum Szenario „Erlebnisraum Kulturlandschaft“ im Jahr 2030 am Beispiel des Testgebietes Hohenstein/Strausberg mittels der UNREAL Game-Engine (erstellt am ZALF).

Die Entwicklung eines entsprechenden Visualisierungssystems bedeutet einen hohen Aufwand: neben Forschungsfragen, z.B. Verfahren zur Erzeugung von botanisch korrekten Pflanzenmodellen und Biotopen, interaktive Spezifikation von Landschaftselementen, prozedurale Reduktion der Szenenkomplexität, spezielle Darstellungs- und Rendering-Verfahren, sind auch umfangreiche technische Entwicklungen zu leisten - u.a. die Anbindung an Geographische Informationssysteme, Computeranimationsysteme und Game Engines. In einer Machbarkeitsstudie wurden daher zunächst der Bedarf und die technische Machbarkeit eines solchen Systems untersucht [6]. Dazu wurden in einem Anwender-Workshop und durch systematische Marktanalyse die Bedürfnislage eruiert, die Anforderungen genauer ermittelt und das Marktpotential abgeschätzt. Eine ergänzende computergrafische Analyse zeigte – vor dem Hintergrund der zu erwartenden Hardware-Entwicklung – die technische Machbarkeit und den zu erwartenden F&E-Aufwand. Auf Basis dieser Studie wird nun die Förderung eines Projektes bei der DBU beantragt. Aufgabe des ZIB wird es sein, neue Echtzeit-Rendering-Verfahren zur Darstellung von komplexen Landschaften zu entwickeln.

Entwicklung von Virtual-Reality-Techniken (Detlev Stalling, Malte Zöckler, Ralf Kähler)

Virtual-Reality-Techniken gestatten es, komplexe räumliche Strukturen wie Biomoleküle oder Neurone besser in ihrer dreidimensionalen Gestalt zu erfassen und mit ihnen zu interagieren. In diesem Zusammenhang wurden für die am ZIB

vorhandene aktive 3D-Projektionswand, mit deren Hilfe Computermodelle stereoskopisch dargestellt werden können, weitere Anwendungen entwickelt – wiederum im Rahmen der Visualisierungsplattform AMIRA. Unter anderem wurde sogenanntes *Head-Tracking* implementiert, ein Verfahren, bei dem mit Hilfe eines zusätzlichen Sensors die aktuelle Kopfposition des Beobachters relativ zum Projektionsschirm detektiert und das darzustellende Bild entsprechend der jeweiligen Perspektive neu berechnet wird.

Ferner wurden diejenigen Programmteile, die zur Erfassung und Verarbeitung der Trackingdaten dienen, an die Schnittstelle der kommerziellen CAVE-Bibliothek angepasst. Dadurch ist es mit wenigen Konfigurationsänderungen möglich, eine Vielzahl von weitverbreiteten Eingabegeräten zu verwenden.

Gegenüber herkömmlicher aktiver Stereotechnik mit Shutter-Brillen bietet die passive Stereoprojektion mit polarisiertem Licht eine Reihe von Vorzügen. Zum einen lassen sich Projektoren verwenden, die wesentlich hellere und schärfere Bilder liefern, zum anderen können billige Polarisationsbrillen benutzt werden, so daß Vorführungen vor einem großen Publikum möglich sind. Exemplarisch wurde am ZIB eine passive Stereoprojektion anlässlich der DFN-Veranstaltung zur Eröffnung des G-WIN Netzes im Hörsaal aufgebaut und demonstriert (siehe Abbildung 2.21). Aufgrund der dabei gemachten positiven Erfahrungen ist der Hörsaal im Frühjahr 2001 dauerhaft mit einer solchen Projektionstechnik ausgerüstet worden.

Publikationen

- [1] *Amira 2.2 — User's Guide and Reference Manual*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Indeed — Visual Concepts GmbH, Berlin, Oktober 2000.
- [2] *AmiraDev 2.2 — Programmer's Guide*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Indeed — Visual Concepts GmbH, Berlin, Oktober 2000.
- [3] Hans-Christian Hege, *Virtuelle Experimente*, in P. Bexte, G. Sievernich (Hrsg.), KERN. Gene, Hirne, Magma, Quarks: Innenansichten der Zukunft. Katalog zur Ausstellung „7 Hügel: Bilder und Zeichen des 21. Jahrhunderts“, Henschel Verlag, Berlin, 2000.
- [4] Andre Merzky: *Data Description*. Proc. ISTHMUS 2000, April 2000, Poznan.
- [5] Gabrielle Allen, Werner Benger, Tom Goodale, Hans-Christian Hege, Gerd Lanfermann, Andre Merzky, Thomas Radke, Edward Seidel, John Shalf: *The Cactus Code: A Problem Solving Environment for the Grid*. Proceedings of



ABBILDUNG 2.21: Bundesforschungsministerin Edelgard Bulmahn und ZIB-Präsident Peter Deuffhard betrachten die 3D-Stereoprojektion im Hörsaal des ZIB während der Eröffnung des G-WIN-Netzes am 30. Juni 2000.

the Ninth IEEE International Symposium on High-Performance Distributed Computing (HPDC-9)

- [6] Adrian Herwig, Philip Paar, Jörg Rekittke, Armin Werner (ZALF), Hans-Christian Hege, Detlev Stalling (ZIB) und Oliver Deussen (Univ. Magdeburg): *Machbarkeitsstudie für ein Visualisierungstool - Analyse des Bedarfes und der Machbarkeit eines computergraphischen Visualisierungssystems für interaktive Planungs- und Umsetzungsprozesse auf Landschaftsebene*, Ergebnisbericht, ZALF, 2000
- [7] Oliver Sander, Daniel Runge: *Fast Surface Reconstruction Using a Probe Sphere*, Report 00-50, ZIB, 2000

2.2.7 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. Im Rahmen einer Diplomarbeit sollen hier im kommenden Jahr Software-Komponenten aus dem Projekt *Polyedrische Untersuchung* zum schnelleren Auffinden eckenminimaler Triangulierungen höherdimensionaler Mannigfaltigkeiten eingesetzt werden.

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)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft aus Mitteln des Herrn Grötschel verliehenen Leibnizpreises

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. \mathcal{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 [5]. 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 [6] haben sich in der Praxis als nützlich erwiesen, um Stabile-Mengen-Probleme exakt bzw. mit akzeptabler Gütegarantie zu lösen (siehe Projekt *Kombinatorische Relaxierungen* und [3]). Ziel ist, durch strukturelle Untersuchungen

von Stabile-Mengen-Polytopen nicht perfekter Graphen die polynomiale Lösbarkeit des Stabile-Mengen-Problems für weitere Graphenklassen zu beweisen.

Untersuchungsobjekte unserer Arbeitsgruppe sind Klassen „fast perfekter“ Graphen: wir verfolgen das neue Konzept *kritischer Kanten* in perfekten Graphen, deren Entfernen zum Verlust der Perfektheit des Graphen führt. Wir untersuchten verschiedene Grapheigenschaften im Zusammenhang mit kritischen Kanten [22, 24] ebenso wie *kritisch perfekte Graphen* (siehe Abbildung 2.22), die ausschließlich kritische Kanten besitzen [20, 22, 23]. Weiter beschäftigten wir uns mit der Frage, „wie perfekt“ Graphen noch sind, die durch Entfernen kritischer Kanten aus perfekten Graphen entstehen. Dazu führten wir ein Maß für die Imperfektheit eines Graphen durch zwei Oberklassen perfekter Graphen ein, *rang-perfekte* und *schwach rang-perfekte Graphen*, die wir durch Relaxierung des Perfektheitsbegriffes bezüglich der Facettenmenge des Stabile-Mengen-Polytops erhalten [22]. Für einige imperfekte Graphen, die aus perfekten Graphen durch Entfernen kritischer Kanten entstehen, wurden Facetten des Stabile-Mengen-Polytops identifiziert und die Zugehörigkeit zur Klasse der rang-perfekten bzw. schwach rang-perfekten Graphen untersucht [21, 22].

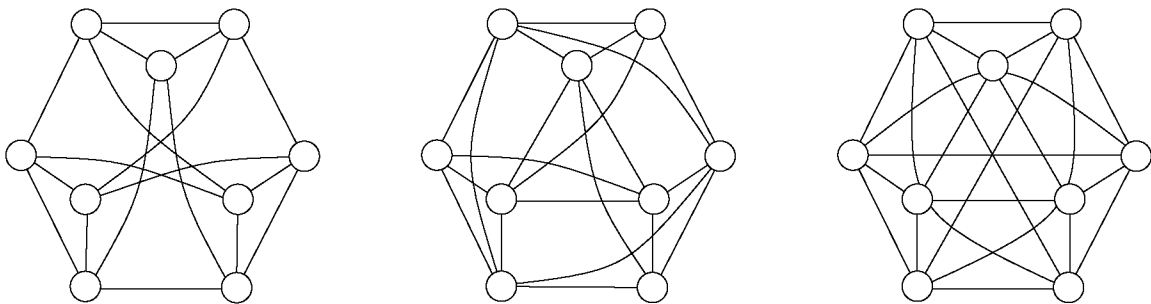


ABBILDUNG 2.22: Beispiele kritisch perfekter Graphen.

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 Simplexe, so spricht man von Triangulierungen. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können (Abbildung 2.23), erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänome-

ne 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.

Nachdem in den Jahren 1997–1999 eine Reihe von theoretischen Resultaten erzielt werden konnte (mittlerweile publiziert in [1, 4, 7, 18]), wurde 1999 das Programmpaket TOPCOM [14] veröffentlicht, mit dem sich explizite kombinatorische Berechnungen mit Triangulierungen von Punktkonfigurationen durchführen lassen.

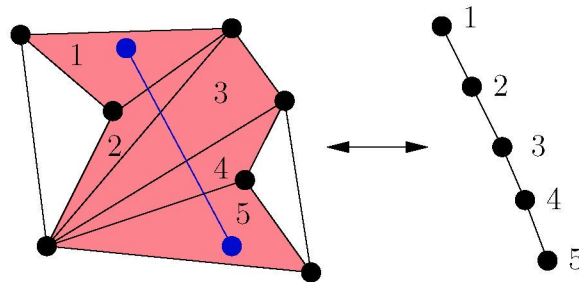


ABBILDUNG 2.23: Der Adjazenzgraph aller Simplexe, die ein Segment schneiden, ist ein Pfad. Dies ist für allgemeine orientierte Matroide nicht offensichtlich. Für sogenannte kreiszulässige Triangulierungen von orientierten Matroiden konnte dies gezeigt werden.

TOPCOM wurde im vergangenen Jahr u. a. dazu verwendet, die 2 822 648 Triangulierungen des (4×5) -Gitters (20 Punkte), welche alle Punkte benutzen, auszurechnen. Die bei der Überprüfung der Santos-Triangulierung [19] erzeugten Daten konnten als Elektronisches-Geometrie-Modell [16] veröffentlicht werden. Elemente der TOPCOM-C++-Bibliothek sollen im Projekt *Kombinatorische Mannigfaltigkeiten* gewinnbringend bei der Überarbeitung der Flip-Heuristik zur Suche minimaler Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten eingesetzt werden.

Ein neues Resultat über die topologischen Eigenschaften einer beliebigen Triangulierung eines *orientierten Matroids* (eine Struktur, die die kombinatorischen Eigenschaften einer Punktkonfiguration hat, aber nicht unbedingt von einer solchen induziert sein muß) besagt folgendes für sogenannte *kreiszulässige* Triangulierungen: Der Adjazenzgraph derjenigen Simplexe, die eine Strecke „schneiden“, ist ein Pfad [15]. Dies ist trivial im Falle einer Punktkonfiguration (realisierbares orientiertes Matroid), im Falle allgemeiner orientierter Matroide ist dies jedoch nicht unmittelbar klar. Dieses Resultat stellt einen Baustein in der Untersuchung der Topologie von Triangulierungen orientierter Matroide dar: während für Punktkonfigurationen alle Triangulierungen topologisch äquivalent zu Bällen sind, ist die Frage nach dem Homotopietyp von Triangulierungen für allgemeine

orientierte Matroide ein offenes Problem.

Dieses Projekt soll mit der Fertigstellung eines Textbuches zusammen mit Jesús De Loera und Francisco Santos im kommenden Jahr abgeschlossen werden. Ein Vorlesungsskriptum (in deutsch) zu einer Lehrveranstaltung an der TU Berlin ist bereits erhältlich [17].

Triangulierte Mannigfaltigkeiten

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Anders Björner (Kungl Tekniska Högskolan, Stockholm, Schweden); Wolfgang Kühnel (Universität Stuttgart); Günter M. Ziegler (Technische Universität Berlin)

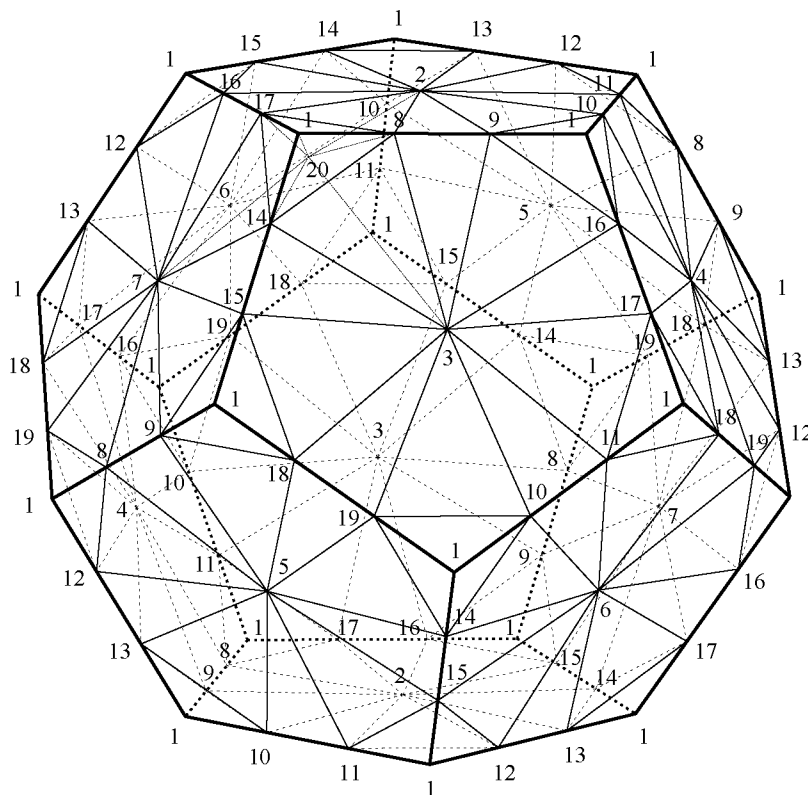


ABBILDUNG 2.24: Symmetrische 52-Ecken-Triangulierung des Weber- und Seifertschen hyperbolischen Dodekaederraumes (19 Ecken auf dem identifizierten Rand des Dodekaeders und 33 Ecken im Inneren).

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:

- 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 unter Verwendung des Programms BISTELLAR [10] 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, 8, 9].
- Man kann 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].

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. Als Implementation ist das Programm BISTELLAR-EQUIVALENT [11] erhältlich.

Neben Mannigfaltigkeiten wurden ebenfalls eckentransitive Triangulierungen von Pseudomannigfaltigkeiten und von zentralsymmetrischen Sphären auf wenigen Ecken enumeriert. Auch hier konnten neue Beispiele gewonnen werden [9].

Im Laufe des Jahres 2000 wurde das im Rahmen dieses Projektes erzielte Material zur Veröffentlichung als Monographie in der Springer-Reihe „Lecture Notes in Mathematics“ überarbeitet. Hierzu wurde die bereits vorhandene Beispielsammlung [12] weiter ausgebaut. So konnte u. a. eine 22-Ecken-Triangulierung des Weber- und Seifertschen hyperbolischen Dodekaederraumes mit Hilfe bistellarer Flips aus einer symmetrischen Starttriangulierung mit 52 Ecken „destilliert“ werden (siehe Abbildung 2.24).

Publikationen

- [1] C. Athanasiadis, J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes II*, Publications De l'Institut Mathematique, Belgrade **66** (1999), 3–15.
- [2] A. Björner und F. H. Lutz, *Simplicial manifolds, bistellar flips and a 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere*, Experimental Mathematics **9** (2000), 275–289.
- [3] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Berichte aus der Mathematik, Shaker Verlag, 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, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, Combinatorica **1** (1981), 169–197.
- [6] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [7] B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Journal of the European Mathematical Society **2** (2000), 179–198.
- [8] W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, Periodica Mathematica Hungarica **39** (1999), 161–183.
- [9] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker Verlag, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [10] ———, *GAP-program BISTELLAR*, Second version 02/99 (First version 11/97 by A. Björner, F. H. Lutz.), online³ erhältlich, 1999.
- [11] ———, *GAP-program BISTELLAR-EQUIVALENT*, Version 02/99, online⁴ erhältlich, 1999.
- [12] ———, *The Manifold Page*, online⁵, 2000.
- [13] J. Rambau, *Projections of Polytopes and Polyhedral Subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker Verlag, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.

³<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/BISTELLAR>

⁴<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/BISTELLAR-EQUIVALENT>

⁵<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/>

- [14] ———, *TOPCOM—Triangulations Of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software unter Gnu Public Licence, online⁶ erhältlich, 1999.
- [15] ———, *Circuit Admissible Triangulations of Oriented Matroids*, Report 00-45, ZIB, 2000.
- [16] ———, *Point configuration and a triangulation without flips as constructed by Santos*, Electronic Geometry Model No. 2000.08.005, 2000, online⁷ erhältlich.
- [17] ———, *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern*, Report 00-46, ZIB, 2000.
- [18] J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes I*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 65–83.
- [19] F. Santos, *A point configuration whose space of triangulations is disconnected*, Journal of the American Mathematical Society **13** (2000), 611–637.
- [20] A. Wagler, *On critically perfect graphs*, Journal of Graph Theory **32** (1999), 394–404.
- [21] ———, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, Discrete Applied Mathematics **95** (1999), 455–466.
- [22] ———, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Cuvillier-Verlag, Göttingen, 2000, Dissertation, TU Berlin.
- [23] ———, *The Classes of Critically and Anticritically Perfect Graphs*, Report 00-29, ZIB, 2000.
- [24] ———, *Critical and Anticritical Edges in Perfect Graphs*, Report 00-49, ZIB, 2000.

2.2.8 Nichtlineare Optimierung

Nichtlineare Ansätze dienen uns zur Nachbildung originär nichtlinearer Zusammenhänge der Realität, zur Modellierung stochastischer Aspekte und zur Relaxierung diskreter Entscheidungsprobleme mit nichtlinearen Kosten oder Nebenbedingungen. Dem ersten Gebiet ist das Projekt zur Steuerung der Lastverteilung in Gasnetzen zuzuordnen. In der Portfoliooptimierung und der Prozeßregelung von Destillationskolonnen ist die Berücksichtigung stochastischer Einflüsse wesentlich. Für quadratische binäre Programme und Graphenpartitionsprobleme untersuchen wir die Qualität semidefiniter Relaxierungen.

⁶<http://www.zib.de/rambau/TOPCOM.html>

⁷<http://www.eg-models.de/>

Die Lösung der nichtlinearen Modelle ist mit hohem Rechenaufwand verbunden. Daher kommt der Entwicklung effizienter Algorithmen, die innerhalb der gegebenen Problemklasse möglichst gute Strukturnutzung erlauben, große Bedeutung zu. In der mehrstufigen konvexen stochastischen Optimierung erreichen wir dies durch rekursive Algorithmen, in der semidefiniten Optimierung mit dem spektralen Bündelverfahren.

Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen

Bearbeitet von: Klaus Ehrhardt, Marc Steinbach

Kooperationspartner: Ruhrgas AG (Essen); PSI AG (Berlin); Alexander Martin (TU Darmstadt); Rüdiger Schultz (Universität Duisburg)

Förderung: BMBF-Förderschwerpunkt „Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“

Eine zentrale Routineaufgabe jedes Gasversorgungsunternehmens ist die kurzfristige (operative) Planung der Lastverteilung im Leitungsnetz zur Deckung des aktuellen Bedarfs. Die Antriebsenergie für den Gastransport verursacht den Hauptanteil der variablen Betriebskosten, so daß eine Kostenminimierung die geschickte Schaltung und Steuerung aller technischen Anlagen erfordert. Dies führt mathematisch auf hochdimensionale gemischt-ganzzahlige Probleme mit nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen.

Im Vorhaben sollen zusammen mit den industriellen Verbundpartnern Ruhrgas AG und PSI AG praxistaugliche nichtlineare Modelle sowie (für den Fall fixierter Schaltvariablen) strukturangepaßte Optimierungsalgorithmen entwickelt und implementiert werden. Als Unterprobleme in Branch-and-Bound-Verfahren sollen die Modelle dann so weit vereinfacht werden, daß einerseits das Gesamtproblem numerisch lösbar ist und andererseits die relevanten Nichtlinearitäten und kombinatorischen Aspekte soweit möglich direkt erfaßt sind.

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 [5, 10].

Die üblichen primalen und dualen Dekompositionsmethoden zerlegen das mehrstufige Problem in kleinere Optimierungsprobleme, die (Clustern von) 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, 8]. 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 [6].

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

Dynamisches Portfoliomanagement

Bearbeitet von: Marc Steinbach

Kooperationspartner: Karl Frauendorfer, Detlef Steiner, Jérôme Koller (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 erzielt 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; weiter ist die Einbeziehung von Termingeschäften zur Absicherung des Währungsrisikos in Arbeit. Besondere Schwierigkeiten entstehen einerseits durch die Größe der Optimierungsprobleme, andererseits durch die Tatsache, daß die Lösungen praktisch immer *hochgradig degeneriert* sind [9]. Die algorithmische Behandlung basiert auf der Ausnutzung problemspezifischer Sparse-Strukturen und auf den inhärenten Regularisierungseigenschaften von Innere-Punkt-Methoden [7, 8]. Eine kommerzielle Version des eigens entwickelten C++-Codes ist seit Ende 1999 bei einer Schweizer Versi-

cherungsgesellschaft 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: René Henrion, Andris Möller (WIAS Berlin); Günter Wozny, Li Pu, Moritz Wendt (TU 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 (modelliert als Szenariobaum) berücksichtigt. Dadurch wird erreicht, daß einerseits die Sicherheit gewahrt bleibt, andererseits aber der erwünschte Einspareffekt nicht durch übertrieben vorsichtige Korrekturen zunichte gemacht wird. Erste Untersuchungen beziehen sich auf ein Anwendungsproblem, das auch im Partnerprojekt behandelt wird: die Steuerung einer Destillationskolonne mit stochastischem Feedstrom. Hierzu wurden mittels eines Trackingansatzes Vergleiche mit dem alternativen Ansatz probabilistischer Beschränkungen durchgeführt. Zur Lösung der entstehenden extrem großen stochastischen Optimierungsprobleme wird eine primal-duale Innere-Punkt-Methode mit direktem rekursivem Löser für die KKT-Systeme eingesetzt [7, 8]. Weitere Untersuchungen zielen auf eine realistischere Modellierung des Destillationsprozesses sowie auf eine Effizienzsteigerung des Verfahrens zur Verbesserung der Echtzeittauglichkeit.

Semidefinite Optimierung

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

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

Die *semidefinite Optimierung* beschäftigt sich mit linearen Programmen über dem konvexen Kegel der positiv semidefiniten Matrizen. Die nichtlineare Struktur des Kegels erlaubt die Modellierung vielfältiger Anwendungen. Diese finden sich z. B. 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.

Das von uns im Laufe der letzten Jahre entwickelte *spektrale Bündelverfahren* [3, 4] bietet hingegen zahlreiche Möglichkeiten, strukturelle Eigenschaften zu nutzen. Es dient der Minimierung des maximalen Eigenwertes einer affinen Matrixfunktion – ein Problem äquivalent zum Dualen eines semidefiniten Programms mit konstanter Spur. Aufbauend auf den traditionellen Bündelverfahren der konvexen Optimierung wird statt des polyedrischen Schnittebenenmodells ein semidefinites Schnittflächenmodell verwendet, über das aufgrund der kontrollierbaren Größe effizient mit Innere-Punkt-Methoden optimiert werden kann. Zur Konstruktion des Modells müssen für die Testmatrix der maximale Eigenwert und ein zugehöriger Eigenvektor bestimmt werden. Dies geschieht vorteilhaft mittels iterativer Verfahren wie der *Lanczos Methode*, die eine volle Nutzung der Struktureigenschaften der beteiligten Matrizen erlaubt.

Im Berichtszeitraum haben wir gezeigt, daß es – wie bei der bereits im Vorjahr entwickelten *ungenauen Auswertung* in der Bestimmung des Eigenwerts und des Eigenvektors – ausreicht, das semidefinite Unterproblem nur approximativ zu lösen, ohne daß dadurch die Konvergenz des Verfahrens gefährdet wird [1]. Dieses Ergebnis rechtfertigt aus theoretischer Sicht die Verwendung der am Computer verfügbaren Zahlen und führt gleichzeitig zu Einsparungen in der Anzahl der Iterationen der Innere-Punkt-Methode wie auch zu größerer Stabilität des Verfahrens durch automatische Anpassung der notwendigen Genauigkeit.

Des weiteren wurde mit *SBmethod* [2] eine C++-Implementierung des spektralen Bündelverfahrens fertiggestellt und unter

<http://www.zib.de/helmberg/SBmethod>

allgemein verfügbar gemacht. In *SBmethod* sind alle bis jetzt entwickelten Konzepte, wie Vorzeichenbedingungen und ungenaue Auswertung in Eigenwertberechnung und semidefinitem Unterproblem, umgesetzt. Es unterstützt wesentliche Struktureigenschaften, wie z. B. dünn besetzte Matrizen und Matrizen niederen Rangs, und bietet vielfältige Möglichkeiten, auch eine Approximation der Lösung des entsprechenden primalen semidefiniten Programms zu erzeugen. In der unabhängigen Bewertung durch H. Mittelmann im Rahmen der *seventh DIMACS challenge* (<http://plato.la.asu.edu/dimacs.html>) erwies es sich als eines der besten Programme für *large scale semidefinite programming*.

Im Rahmen des Projekts *Frequenzzuweisung im Mobilfunk* stellte sich das Problem, untere Schranken für die Minimierung der Gleichkanalinterferenz zu ermit-

teln. Über eine semidefinite Relaxierung von Max-k-Cut konnte mit `SBmethod` für einige praxisrelevante Beispiele nachgewiesen werden, daß mindestens ein Drittel bis die Hälfte der Interferenz der besten bekannten Lösungen unvermeidbar ist. Zur Zeit ist keine andere praktisch umsetzbare Relaxierung bekannt, die Schranken vergleichbarer Güte liefert.

Publikationen

- [1] C. Helmberg, *Semidefinite Programming for Combinatorial Optimization*, Habilitationsschrift TU Berlin, Januar 2000; Report 00-34, ZIB, 2000.
- [2] ———, *SBmethod — A C++ Implementation of the Spectral Bundle Method*, Manual to Version 1.1, Report 00-35, ZIB, 2000, URL: <http://www.zib.de/helmberg/SBmethod>.
- [3] C. Helmberg und K. C. Kiwiel, *A Spectral Bundle Method with Bounds*, Preprint SC 99-37, ZIB, 1999.
- [4] C. Helmberg und F. Rendl, *A spectral bundle method for semidefinite programming*, SIAM J. Optim. **10** (2000), Nr. 3, 673–696.
- [5] M. C. Steinbach, *Structured interior point SQP methods in optimal control*, Z. Angew. Math. Mech. **76** (1996), Nr. S3, 59–62.
- [6] ———, *Recursive Direct Optimization and Successive Refinement in Multistage Stochastic Programs*, Preprint SC 98-27, ZIB, 1998.
- [7] ———, *Recursive direct algorithms for multistage stochastic programs in financial engineering*, Operations Research Proceedings 1998 (P. Kall und H.-J. Lüthi, Hrsg.), Springer-Verlag, 1999, S. 241–250.
- [8] ———, *Hierarchical sparsity in multistage convex stochastic programs*, Stochastic Optimization: Algorithms and Applications (Kluwer Academic Publishers) (S. Uryasev und P. M. Pardalos, Hrsg.), Boston, Dordrecht, Lancaster, 2000, S. 363–388.
- [9] ———, *Markowitz revisited: Mean-variance models in financial portfolio analysis*, erscheint in SIAM Rev. **43** (2001), Nr. 1.
- [10] M. C. Steinbach, H. G. Bock, G. V. Kostin und R. W. Longman, *Mathematical optimization in robotics: Towards automated high speed motion planning*, Surveys Math. Indust. **7** (1998), Nr. 4, 303–340.

2.2.9 Telekommunikation

Telekommunikation stellt die Schlüsseltechnologie der sich zunehmend entwickelnden Informationsgesellschaft dar. Gegenwärtig kann man die intensivierete Nutzung bestehender Kommunikationsmöglichkeiten sowie eine anhaltende Erschließung neuer Anwendungen beobachten. Dieser lukrative Markt unterliegt aber insbesondere auch durch den rasanten technischen Fortschritt einem stetigen Wandel, der die Unternehmen immer wieder zu enormen Investitionen zwingt, wie etwa bei der Versteigerung der UMTS-Lizenzen. Um sich innerhalb der Telekommunikationsbranche behaupten zu können, ist daher neben der effizienten Nutzung der verfügbaren Ressourcen auch die wirtschaftliche Umsetzung strategischer Potentiale von entscheidender Bedeutung.

Zur Beantwortung der damit zusammenhängenden Fragestellungen eignen sich insbesondere mathematische Optimierungsverfahren. Dies schlägt sich sowohl im erfolgreichen Einsatz von uns entwickelter Software in der Praxis als auch in der steigenden Nachfrage nach Lösungen für neue Probleme nieder. Die Vielfalt der dabei untersuchten Aufgaben läßt sich anhand der im Rahmen dieses Schwerpunktes durchgeführten Projekte ablesen.

Standortplanung für Telekommunikationsnetze

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

Kooperationspartner: Telekom Austria AG (Wien, Österreich); E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf); DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (Berlin); Technische Universität Darmstadt

Telekommunikationsnetze besitzen oft Baumstruktur. 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 Kernnetzknotten verbunden werden, die einen Teil des sogenannten Kernnetzes bilden.

Wir untersuchen in diesem Projekt die Frage, wo Konzentratoren und Kernnetzknotten eingerichtet werden müssen, um ein den Anforderungen der Netzplaner entsprechendes kostengünstiges Netz zu erhalten.

Um in der Praxis einsetzbare Lösungen zu erreichen, müssen bei der Planung eine Vielzahl von Anforderungen berücksichtigt werden. Beispielsweise sind nicht alle Verbindungen zwischen Knotten möglich oder nur in bestimmten Kapazitäten. Vielfach sind Konzentratoren und Kernnetzknotten noch mit diversen Kapazitätseinschränkungen versehen.

Wir haben mathematische Modelle für die schwierigen, aus dieser Aufgabenstellung resultierenden Probleme erstellt und begonnen, Verfahren zu ihrer Lösung

zu entwickeln.

Im Laufe des Jahres wurden Kooperationsverträge mit der Telekom Austria über *Optimale Standort- und Vermittlungswegeplanung* und mit E-Plus über *Entwicklung von Optimierungsverfahren für die MSC-Standortplanung* abgeschlossen. Auf diese Weise können die bei der Standortplanung in Kommunikationsnetzen auftretenden Probleme anhand realer Daten und konkreter Anforderungen weiter untersucht werden. Siehe Abbildung 2.25

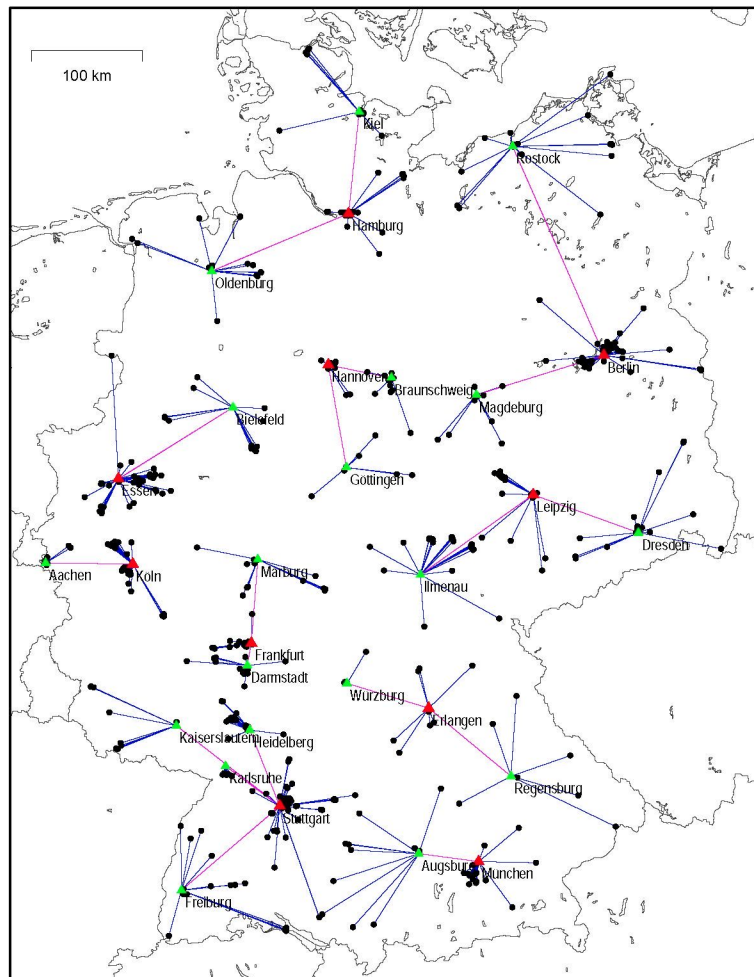


ABBILDUNG 2.25: Lösung des Clusteringproblems beim G-WiN.

Momente der Abgangsströme für ein Link

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt–Universität zu Berlin); Siemens AG (München)

Mittelwert und Varianz eines stationären Call-Ankunftsprozesses können definiert

werden durch Mittelwert bzw. Varianz der Anzahl belegter Leitungen in einem virtuellen unendlichen Bündel von Leitungen, auf das die ankommenden Calls virtuell geschickt werden, wobei die Belegungszeiten in dem unendlichen Bündel die durch den Call-Ankunftsprozeß gegebene Verteilung haben, aber unabhängig von schon ausgewürfelten Belegungszeiten sind, d. h. bei jeder (virtuellen) Ankunft werden die Belegungszeiten neu ausgewürfelt (freed traffic).

Die obige Definition von Mittelwert und Varianz für einen Call-Ankunftsprozeß ist unabhängig von der Quelle des Call-Ankunftsprozesses, z. B. Überlauf- oder durchgehender Strom von einem anderen Link, und sie sollte wegen der Kompatibilität der sich überlagernden Ströme insbesondere bei größeren Netzwerken Anwendung finden. Die Berechnung der so definierten Varianz erwies sich jedoch sowohl theoretisch als auch numerisch als recht kompliziert. Deshalb wurde diese Definition bisher in Netzwerk-Analyse-Algorithmen nicht benutzt. Bei bisher implementierten Algorithmen, die auf einer Anpassung der ersten beiden Momente beruhen, wurde eine Definition der Varianz zugrunde gelegt, in welche die Quelle des Call-Ankunftsprozesses explizit eingeht.

Unter Benutzung der oben angegebenen Definition wurden in diesem Projekt numerisch stabile Algorithmen für Mittelwert und Varianz des Überlauf- und durchgehenden Stroms für ein Link mit einem durch Mittelwert und Varianz charakterisierten Ankunftsstrom, dessen Belegungszeiten exponentiell verteilt sind, entwickelt. Da diese Algorithmen sehr schnell sind, können sie in Netzwerk-Analyse-Algorithmen benutzt werden, die auf einer Anpassung der ersten beiden Momente und einer einheitlichen Behandlung aller Ströme beruhen.

Performance-Analyse eines Round-Robin-Schedulers

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (Humboldt–Universität zu Berlin); Siemens AG (München)

In Telekommunikationssystemen tritt häufig die Situation auf, daß verschiedene Prozesse durch einen einzigen Prozessor bedient werden, d. h. die Prozessorkapazität muß zwischen verschiedenen Typen von Forderungen aufgeteilt werden. Zur Absicherung und Garantie von Performance-Charakteristiken für die verschiedenen Prozesse (z. B. Verweilzeiten) und für das System insgesamt (z. B. Auslastung) werden verschiedene Warte- und Bedienungsdisciplinen benutzt. Bei der (gewichteten) Round-Robin-Disziplin erhalten die nichtleeren Warteschlangen nacheinander zyklisch ein festes Quantum an Bedienung (abhängig von der Warteschlange). Als Grenzfall, bei dem die Quanten geeignet gegen Null streben, ergibt sich die (gewichtete) Processor-Sharing-Disziplin, vgl. [4, 5]. Die Round-Robin-Disziplin soll sichern, daß Forderungen mit kleiner Bedienungsanforderung nicht zu lange auf das Ende ihrer Bedienung warten müssen.

In diesem Projekt wurde ein System mit zwei Prozessen analysiert, nämlich mit

einem Batch-Prozeß, der einen unendlichen Bedienungsbedarf hat, und einem meldungsverarbeitenden Prozeß. Der Input des meldungsverarbeitenden Prozesses wird durch ein Gate getaktet, seine Bedienzeitverteilung ist eine Mischung aus deterministischen Zeiten. Die beiden Prozesse werden nach einer speziellen gewichteten Round-Robin-Disziplin bedient. Dieses System modelliert die Warte- und Bedienungsdisziplin eines Vermittlungssystems. Von besonderem Interesse ist die Verweilzeitverteilung für den meldungsverarbeitenden Prozeß, um eine vorgegebene Qualität garantieren zu können.

Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)

Bearbeitet von: Andreas Bley, Martin Grötschel, Thorsten Koch

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

Ende Juni 2000 wurde das Gigabit-Wissenschaftsnetz **G-WiN** offiziell als Nachfolger des Breitband-Wissenschaftsnetzes **B-WiN** gestartet. Im Rahmen dieses Projektes werden verschiedene Fragestellungen zum effizienten Einsatz der verfügbaren Ressourcen für den Betrieb des Netzes untersucht. Das Ziel ist die Entwicklung von mathematischen Modellen und Algorithmen zur Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes.

Das **G-WiN** ist eines der größten privaten Hochgeschwindigkeitsnetze der Welt. Es verbindet mehr als 750 wissenschaftliche Einrichtungen und andere Standorte miteinander und hat bereits in seiner ersten Ausbaustufe ein Datenvolumen von ca. 220 Terabyte pro Monat zu bewältigen. Bei Aufbau, Erweiterung und Betrieb eines solchen Netzes stellt sich die Frage, wie die bereits vorhandenen oder neu zu beschaffenden Ressourcen möglichst effizient genutzt werden können.

In den vorangegangenen Jahren wurden im Projekt „Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)“ Planungsprobleme untersucht, die in erster Linie beim Aufbau eines neuen Netzes auftreten: Die Auswahl geeigneter Kernnetzknotten, die Zuordnung der Anwenderstandorte zu diesen Kernnetzknotten sowie die Planung des Kernnetzes, jeweils mit dem Ziel der Kostenminimierung.

Für einen effizienten Betrieb und eventuelle Erweiterungen des Netzes sind ähnliche Fragestellungen wie beim Aufbau des Netzes interessant, jedoch mit teilweise stark veränderten Nebenbedingungen und Zielvorgaben. So sind nun nicht mehr minimale Netzkosten das primäre Ziel, sondern die Optimierung verschiedener Qualitätskriterien wie zum Beispiel der Kanten- oder Knotenlast.

Dabei sind verschiedene technische und planerische Nebenbedingungen zu berücksichtigen. So ist zum Beispiel bei der Erweiterung des Kernnetzes die Konfiguration der bereits vorhandenen Hardware zu berücksichtigen. Bisher geschaltete Verbindungen können nicht beliebig getrennt und durch andere Verbindungen ersetzt oder beschaltete Endgeräte nicht beliebig von einem Standort an einen anderen verlegt werden, da dies unter Umständen zu einer Unterbrechung des ge-

samten Netzbetriebes führen würde. Neue Geräte können nur im Rahmen eines Budgets angeschafft werden.

Außerdem sollen die Netze ein hohes Maß an Ausfallsicherheit bieten. Für das Kernnetz heißt das, daß die Kapazitäten so zu wählen sind, daß selbst beim Ausfall einzelner Netzwerkkomponenten noch ein festgelegter Minimalanteil aller Verkehrsanforderungen auf Alternativwegen im Netz geroutet werden kann.

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. Um die Laufzeiten und Laufzeitschwankungen der Daten im **G-WiN** möglichst gering zu halten, kann außerdem die maximal zulässige Routingweglänge (Hop-Zahl) beschränkt werden.

Bei einem ersten Versuch, die neuen Nebenbedingungen und Zielsetzungen in die bisher existierenden mathematischen Modelle zu integrieren, zeigte sich, daß dies zwar prinzipiell möglich war, die praktischen Probleme aber nicht mehr in vertretbarer Zeit gelöst werden konnten. Diese Schwierigkeiten ließen sich durch den Übergang zu einer anderen mathematischen Formulierung weitestgehend beheben. Für diese neue Formulierung wurde ein Schnittebenenverfahren und einige darauf basierende Rundungsheuristiken implementiert. Bei der mathematischen Untersuchung des Modells konnten einige neue Klassen von gültigen Ungleichungen identifiziert werden. Für diese Ungleichungsklassen wurden Separationsalgorithmen implementiert und in das Schnittebenenverfahren integriert.

Dimensionierung ausfallsicherer Übertragungsnetze

Bearbeitet von: Roland Wessälly

Kooperationspartner: Telekom Austria AG (Wien, Österreich), E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

In Kooperationen mit E-Plus und Telekom Austria AG 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 den Netzbetreibern eingesetzt wird.

Wir betrachten das Transportnetzplanungsproblem eines Telekommunikationsanbieters. Dieses Problem setzt auf logischen Kommunikationsanforderungen zwi-

schen 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 Netzkomponente 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 Schrittabenverfahren (siehe [1, 12]) zur Lösung der betrachteten Optimierungsprobleme entwickelt. Mit Hilfe neuer Klassen von Ungleichungen, Separationsalgorithmen und Heuristiken werden in dem Schrittabenverfahren 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.

Optimierung von Signaling Transfer Points

Bearbeitet von: Arie Koster, Roland Wessälly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Förderung: Europäische Union / DONET

Das Signalisierungsnetz ist für die gesamte Leistung eines Telekommunikationsnetzes kritisch. Sogenannte Signaling Transfer Points (STPs) bilden die Schalter im Signalisierungsnetz. Ein STP enthält mehrere Common Channel Distributors (CCDs). Die beste Leistung erzielt ein STP dann, wenn die Verkehrslast der anliegenden Verbindungen gleichmäßig über die CCDs verteilt ist. Bei der Zuordnung der Verbindungen zu den CCDs müssen verschiedene Bedingungen erfüllt werden, um die Überlebensfähigkeit der STPs bei Ausfall einer Komponente zu garantieren.

Die Zuordnung der Verbindungen zu den CCDs soll aufgrund des ständigen Wandels der Verkehrsstruktur regelmäßig neu optimiert werden. Da die Netzkapazität während der Umordnung der Verbindungen reduziert ist, soll die Anzahl der not-

wendigen Änderungen möglichst klein sein.

Das Problem wird als ganzzahliges lineares Programm formuliert. Die Zielfunktion bildet die zu minimierende Differenz zwischen der maximalen und minimalen Auslastung der CCDs ab. Für die Beschränkung der Anzahl der Änderungen werden zwei alternative Ansätze verglichen:

1. Die Anzahl der Änderungen wird explizit durch einen Parameter B nach oben beschränkt.
2. Die Zielfunktion wird durch die zu minimierende Anzahl der Änderungen ersetzt und die maximale Lastdifferenz in einer zusätzlichen Bedingung durch den Parameter D beschränkt.

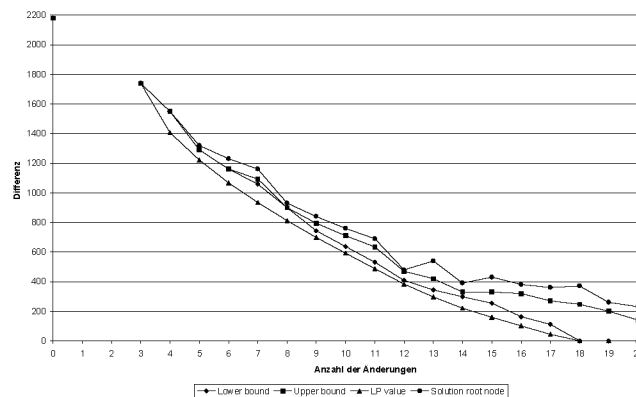


ABBILDUNG 2.26: Ergebnisse für unterschiedliche Werte von B , die maximale Anzahl der Änderungen.

Das zur Lösung von ganzzahligen linearen Programmen verwendete Softwarepaket CPLEX findet innerhalb einer Stunde (fast) optimale Lösungen. Durch Variation des Parameters B (oder D) kann der Netzplaner die Lösungen verschiedener Szenarien vergleichen. Abbildung 2.26 zeigt die Ergebnisse für unterschiedliche Werte von B . Weitere Informationen zu diesem Thema sind im ZIB-Report 00–18 [10] zusammengefasst.

Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze

Bearbeitet von: Arie Koster, Frank Lutz, Adrian Zymolka

Kooperationspartner: Telekom Austria AG (Wien, Österreich); DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin); T-Nova Deutsche Telekom Innovationsgesellschaft mbH (Berlin)

Das Wachstum des Verkehrsbedarfs in Telekommunikationsnetzen hat in letzter

Zeit immer wieder zu Kapazitätsengpässen geführt. Aus Sicht der Netzbetreiber ist es daher erforderlich, die vorhandenen Kapazitäten im Kernnetz rasch und flexibel auszubauen, um die steigenden Anforderungen langfristig erfüllen zu können. Dabei wird zunehmend die neue, optische Technologie verwendet, deren fortschreitende Entwicklung immer größere Potentiale erschließt.

Den Grundbaustein optischer Netze stellen Glasfasern dar, auf denen digitale Signale in Form kurzer Lichtpulse übertragen werden. Die dadurch erzielbaren Übertragungsraten liegen wesentlich höher als bei elektronischen Signalen. Zudem erlaubt das optische Medium ein sogenanntes *Wavelength Division Multiplexing* (WDM), bei dem auf einer Glasfaser durch Verwendung verschiedener Wellenlängen mehrere Kanäle parallel genutzt werden können. Zum einen wird dadurch eine Vervielfachung der bestehenden Kapazitäten erreicht. Zum anderen steigert WDM auch die Flexibilität der Telekommunikationsnetze, da sich künftige Kapazitätsänderungen lediglich durch den Austausch von Endgeräten realisieren lassen. Schließlich werden in absehbarer Zeit sogenannte *Optical Cross-Connects* (OXC) verfügbar sein. Dabei handelt es sich um optische Schalter in den Netzknoten, bei denen das durchlaufende Signal zur Weitervermittlung nicht mehr wie bisher in eine elektronische Form umgewandelt werden muß. Durch die Integration dieser Schalteinheiten innerhalb der Netze entstehen durchgängige optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden.

Für die Planung optischer Netze seitens der Netzbetreiber ist es notwendig, zu gegebenen Bedarfen eine Lichtwegkonfiguration zu bestimmen, mit der die Gesamtkosten des Netzes minimiert werden. Zudem sind Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen, um auch in Störsituationen noch eine festgelegte Netzperformance gewährleisten zu können. In Kooperation mit unseren Projektpartnern sind dafür zum einen effiziente mathematische Verfahren zu entwickeln, mit denen sich eine geeignete statische Konfiguration der Lichtwege berechnen läßt. Zum anderen sollen durch Vergleich von Szenarien mögliche Auswirkungen unterschiedlicher technologischer Entwicklungen auf die Planung und das Management optischer Netze erkundet werden. Parallel wird in einem weiteren Projekt innerhalb der Abteilung Optimierung das dynamische Netzverhalten bei sich zeitlich ändernden Bedarfen untersucht (siehe Projekt „Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze“).

Im Berichtszeitraum wurde die Modellierung der Problemstellung vorerst ohne Ausfallsicherheit fokussiert. Wir haben zunächst verschiedene Formulierungen für das Planungsproblem optischer Netze als ganzzahliges lineares Programm erarbeitet. Aufgrund der hohen Komplexität des Gesamtproblems verfolgen wir einen Dekompositionsansatz, bei dem zwei aufeinander aufbauende Teilprobleme betrachtet werden.

In Anlehnung an die bisherige Netzplanung umfaßt das erste Teilproblem das Routing der Lichtwege und damit einhergehend die Dimensionierung der erforder-

derlichen Kapazitäten. Bei der Übertragung bekannter Verfahren haben sich jedoch zusätzliche Fragestellungen ergeben, wie etwa die notwendige Ganzzahligkeit von Flüssen, die das Lichtwegrouting darstellen. Zur Untersuchung der Einflüsse dieser neuen Aspekte wurde mit der Implementierung einer Erweiterung vorhandener Software [12] begonnen, durch die sich auch die spezifischen Eigenschaften optischer Netze abbilden lassen.

Im zweiten Teilproblem ist für die Lichtwege eine konfliktfreie Wellenlängenzuordnung zu ermitteln. Ein Konflikt tritt dann auf, wenn unterschiedliche Lichtwege auf einer Glasfaser die gleiche Wellenlänge verwenden. Konverter ermöglichen es, innerhalb der Lichtwege die Wellenlänge zu wechseln. Aufgrund der hohen Kosten ist die Anzahl der Konverter zu minimieren. Als neuartiger Aspekt im Rahmen der Netzplanung ist diese Aufgabenstellung für optische Netze typisch. Sie führt in natürlicher Weise auf ein Pfadfärbungsproblem in Graphen, für das zunächst Heuristiken entwickelt wurden. Zudem ist eine Formulierung als ganzzahliges lineares Programm hergeleitet worden, die den Ausgangspunkt zur Entwicklung eines exakten Verfahrens darstellt. Hierfür konnten bereits erste theoretische Resultate erzielt werden [11].

Frequenzzuweisung im Mobilfunk

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf)

Den Mobilfunknetzbetreibern steht jeweils 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 dicht beieinander liegende 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 aller technischen und rechtlichen Nebenbedingungen mit dem Ziel, möglichst wenige störende Interferenzen zu verursachen. Eine Schätzung der gegebenenfalls auftretenden Interferenz erhält der Netzbetreiber durch Signalprädiktionsrechnungen oder, in seltenen Fällen, durch Meßfahrten. Zusammen mit den Nebenbedingungen stellen die Interferenzprädiktionen den Hauptanteil der Eingabedaten für die Frequenzplanung dar.

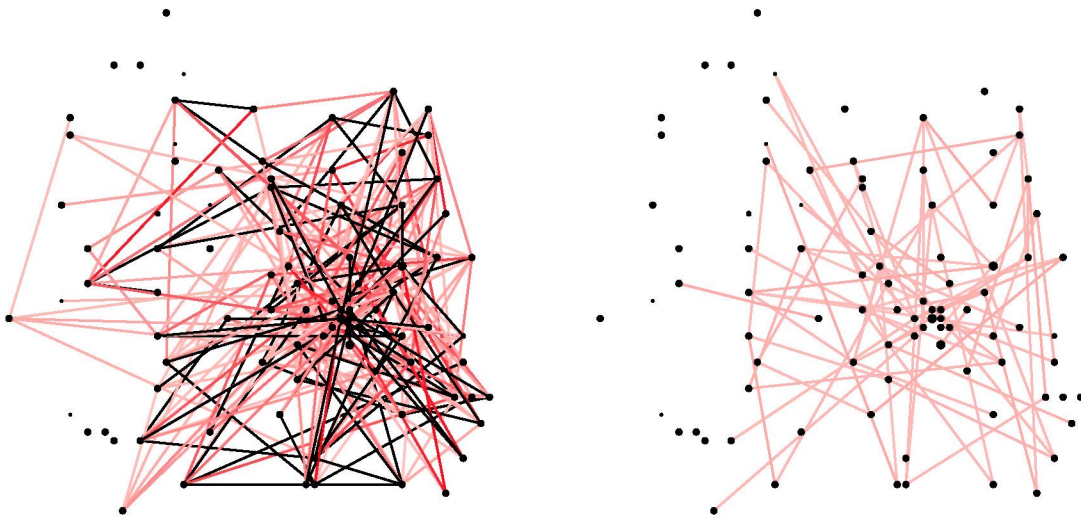


ABBILDUNG 2.27: Die beiden Bilder zeigen die Interferenzsituation eines Gebietes für zwei verschiedene Frequenzpläne. Die schwarzen Punkte stellen Standorte von Transceivern dar. Interferieren zwei Transceiver, so ist dies durch eine Linie symbolisiert. Je dunkler die Linie, desto stärker ist die Interferenz. 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.

Dieses Projekt läuft seit September 1995. Anfangs hatte es hauptsächlich die Entwicklung von Verfahren zur automatischen Erstellung von Frequenzplänen zum Ziel. Deshalb standen zunächst der Entwurf und die Implementierung von schnellen *primalen Heuristiken* zur Berechnung interferenzarmer Zuweisungen im Mittelpunkt. Im Vergleich zu den bisher genutzten Verfahren konnten deutliche Verbesserungen erzielt werden [3], siehe Abbildung 2.27. Ein Teil der Verfahren ist seit längerem bei der E-Plus Mobilfunk GmbH im praktischen Einsatz und hat sich dort bewährt [8].

Im Jahr 2000 lag der Schwerpunkt der Projektarbeit auf der Entwicklung von Methoden, mit deren Hilfe sich das Ausmaß der unvermeidbaren Interferenz nach unten abschätzen läßt. Ein Durchbruch gelang in Zusammenarbeit mit Christoph Helmberg (ZIB) mit Hilfe von Verfahren aus der Semidefiniten Programmierung. Durch deren Einsatz konnten die bisher mit Abstand besten unteren Schranken für unvermeidbare Gleichkanalinterferenz berechnet werden. Insgesamt ließ sich so nachweisen, daß einige heuristisch generierte Frequenzzuweisungen nur etwa doppelt soviel Interferenz verursachen, wie nachweislich unvermeidbar ist.

In Zusammenarbeit mit Arie Koster (ZIB) wurde ein Internet-Server [7] aufgesetzt. Neben Beschreibungen verschiedener Varianten von Frequenzzuweisungsproblemen, siehe auch [6], enthält der Server auch Testdatensätze zu diesen Varianten. Insbesondere werden auch aus der Praxis stammende Planungsprobleme zu Forschungszwecken zur Verfügung gestellt.

Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly, *Cost-efficient network synthesis from leased lines*, Annals of Operations Research **76** (1998), 1–20.
- [2] A. Bley und T. Koch, *Optimierung des G-WiN*, DFN-Mitteilungen **54** (2000), 13–15.
- [3] R. Borndörfer, A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. Martin, *Frequency assignment in cellular phone networks*, Annals of Operations Research **76** (1998), 73–93.
- [4] A. Brandt und M. Brandt, *On the sojourn times for many-queue head-of-the-line processor-sharing systems with permanent customers*, Math. Meth. of Operations Research **47** (1998), 181–220.
- [5] ———, *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.
- [6] A. Eisenblätter, M. Grötschel und A.M.C.A. Koster, *Frequency Planning and Ramifications of Coloring*, Report 00-47, ZIB, 2000.
- [7] A. Eisenblätter und A. M. C. A. Koster, *Fap web—a website about frequency assignment problems*, <http://fap.zib.de/>, 2000.
- [8] A. Eisenblätter, T. Kürner und R. Fauß, *Radio planning algorithms for interference reduction in cellular networks*, Communications for the Millennium. COST 252/259 Joint Workshop, University of Bradford, 21–22 Apr. 1998, 1998, 87–92.
- [9] C. P. M. van Hoesel, A. M. C. A. Koster, R. L. M. J. van de Leensel und M. W. P. Savelsbergh, *Polyhedral Results for the Edge Capacity Polytope*, Report 00-22, ZIB, 2000.
- [10] A. M. C. A. Koster, *Re-Optimization of Signaling Transfer Points*, Report 00-18, ZIB, 2000.
- [11] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Stable Multi-Sets*, Report 00-36, ZIB, 2000.

- [12] R. Wessälly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Dissertation, TU Berlin, 2000.

2.2.10 Ganzzahlige Optimierung

Die Ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, in denen Güter oder Entscheidungen unteilbar sind. Ein Mitarbeiter kann einem Projekt entweder zugeteilt werden oder nicht, für Datenleitungen in der Telekommunikation stehen nur bestimmte diskrete Kapazitätsstufen wie 64 KBit, 2 MBit, 34 MBit usw. zur Auswahl, ein Speditionsunternehmen kann sich nicht 3.7 neue LKW anschaffen.

Durch solche Ganzzahligkeitsbedingungen werden die Probleme erheblich schwieriger als entsprechende Probleme, in denen alle Variablen kontinuierlich sind. Für den kontinuierlichen Fall stellt die Lineare Programmierung effiziente Lösungsmethoden zu Verfügung. In den sogenannten Schnittebenenverfahren werden die Methoden der Linearen Programmierung eingesetzt, um Ganzzahlige Optimierungsprobleme zu lösen. Dazu ist aber zusätzlich eine besondere Kenntnis der spezifischen Problemstruktur erforderlich.

Für besonders wichtige Probleme, für sehr große Instanzen und für algorithmische Spitzenleistungen werden Spezialstudien betrieben, um die Struktur des jeweiligen Problems besser zu verstehen. Im Berichtszeitraum haben wir an zwei Problemen geforscht. Das m -Cost ATSP, eine Variante des berühmten Traveling-Salesman-Problems, tritt bei der Steuerung von Druckmaschinen auf. Das Steinerbaumproblem spielt u. a. im Chip-Design und in der Genetik eine Rolle.

Das m -Cost ATSP

Bearbeitet von: Christoph Helmberg

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. Aufgrund neuer Anknüpfungspunkte zum Projekt *Echtzeit-Steuerung von Aufzugssystemen* soll auch weiter an diesem Problemkreis gearbeitet werden.

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.

Dieses Auftragsplanungsproblem läßt sich als ganzzahliges (binäres) lineares Programm mit konvexer, stückweise linearer Zielfunktion formulieren. Die konvexe Hülle der zulässigen Lösungen bezeichnen wir als das m -Cost-ATSP-Polytop. Für

dieses wurden bereits in [4] wesentliche Klassen von facettendefinierenden Ungleichungen aufgezeigt.

Schwerpunkt in diesem Jahr war die Entwicklung eines Branch&Cut-Programms für eine beliebige Anzahl m von Maschinen unter Nutzung der Klassenbibliothek ABACUS und die Entwicklung von Heuristiken zur Separierung der *geschachtelten Konflikt-Ungleichungen* [7].

In Hinblick auf die sich anbietende Nutzung in anderen Projekten wollen wir unsere Arbeit an diesem Problem fortsetzen, um sowohl zu allgemein einsetzbaren und effizienten Implementierungen zu kommen als auch um neue Ideen zur Separierung zu erproben.

Optimale Lösung von Steinerbaumproblemen in Graphen/SteinLib

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Technische Universität Darmstadt; Technische Universität Braunschweig; National Institutes of Health, USA

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.

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.

Die von uns eingerichtete und im Internet unter <http://elib.zib.de/steinlib> abrufbare Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen wurde intensiv überarbeitet und erweitert. Eine Veröffentlichung zu den enthaltenen Instanzen ist als Preprint [6] erschienen und wird voraussichtlich 2001 als Teil eines Buches über Steinerbaumprobleme in der Industrie erscheinen.

In diesem Projekt wurde ein leistungsstarkes Programm zur Lösung von Steinerbaumproblemen entwickelt. Das Programm basiert auf einem Schnittebenenverfahren und wird durch vielfältiges Preprocessing und primale Heuristiken ergänzt. Es ist uns gelungen, beweisbare Optimallösungen für viele in der Literatur bekannte Instanzen des Steinerbaumproblems in Graphen zu finden.

Im Rahmen von Kooperationen wurde auch an der Lösung von in der Praxis

auftretenden Problemen gearbeitet. So konnten Lösungen für Steinerarboreszenzprobleme gefunden werden, die für Genanalysen benötigt werden und aus Vererbungsgraphen entstanden sind. Die Ergebnisse dieser Zusammenarbeit wurden in diesem Jahr im *American Journal of Human Genetics* [5] veröffentlicht (siehe Abbildung 2.28).

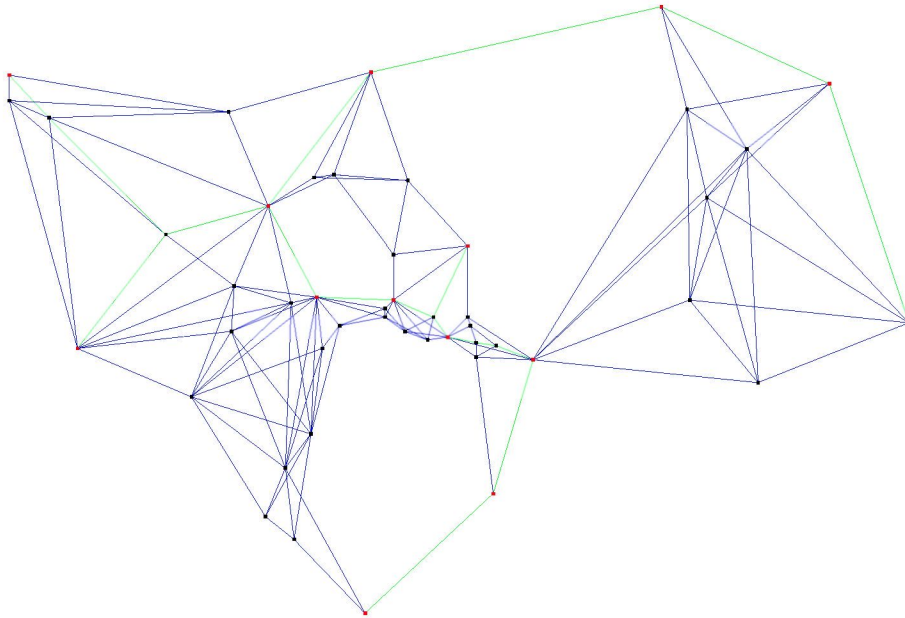


ABBILDUNG 2.28: Beispiel für ein Steinerbaumproblem mit 52 Punkten in Berlin.

Kombinatorische Relaxierungen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer

Kooperationspartner: Robert Weismantel (Universität Magdeburg)

Wir untersuchen in diesem Projekt Relaxierungen von kombinatorischen Optimierungsproblemen, die durch die polyedrische Einbettung eines kombinatorischen Optimierungsproblems in ein anderes Problem entstehen. Mit solchen “kombinatorischen Relaxierungen” lassen sich polyedrische Kenntnisse und Algorithmen algebraisch von einem Problem zum nächsten übertragen. Auf diese Weise lassen sich beispielsweise eine ganze Reihe von Ungleichungstypen aus der polyedrischen Kombinatorik als Varianten von Kreisungleichungen für das Stabile-Mengen-Problem erklären und polynomial separieren, darunter die Möbius-Leiter-Ungleichungen für das Azyklische-Subdigraphen-Problem, die 2-Chorded-Cycle-Ungleichungen für das Cliques-Partitionierungs-Problem, die Odd-Closed-Alternating-Trail-Ungleichungen für das ATSP und andere mehr.

Im Berichtszeitraum haben wir mit Untersuchungen zur Anwendung solcher Techniken auf allgemeinere Fragestellungen, wie z. B. gewisse Klassen ganzzahli-

ger Programme mit Blockstrukturen, begonnen. Für solche Probleme sind keine strukturellen Ungleichungen bekannt, so daß in der Regel nur allgemeine Schnittebenen-techniken verfügbar sind. Wir erhoffen uns von unseren Untersuchungen Fortschritte bei der Bestimmung von unteren Schranken.

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

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998. Shaker Verlag, 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.
- [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] J. J. Johnston, R. I. Kelley, T. O. Crawford, D. H. Morton, R. Agarwala, T. Koch, A. A. Schäffer, C. A. Francomano und L. G. Biesecker, *A novel nemaline myopathy in the Amish caused by a mutation in troponin T1*, American Journal of Human Genetics, Oktober 2000, 814–821.
- [6] T. Koch, A. Martin und S. Voß, *SteinLib: An Updated Library on Steiner Tree Problems in Graphs*, ZIB-Report ZR 00-37, ZIB, 2000, <http://elib.zib.de/steinlib>.
- [7] O. Mänz, *Schnittebenenverfahren für das m -Cost ATSP*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, September 2000.

2.2.11 Online-Optimierung

Die *Online-Optimierung* geht im Gegensatz zur klassischen Optimierung davon aus, daß nicht sämtliche Daten eines Problems vorab bekannt sind, sondern Entscheidungen auf der Basis unvollständigen Wissens getroffen werden müssen. Die Ereignisse, die nach einer Entscheidung eintreten, zeigen, ob diese „gut“ oder „schlecht“ war. Die Entwicklung geeigneter Gütekriterien und Algorithmen ist ein aktuelles Forschungsthema in der Online-Optimierung.

In der Telekommunikation treten Online-Probleme auf, die Entscheidungen in *Echtzeit* erfordern. Echtzeitfähige Algorithmen müssen in der Lage sein, fristgerecht Antworten zu liefern. Beispielsweise stehen für die Bearbeitung neu auf-

tretender Verbindungsanfragen und das Rerouting in Ausfallsituationen nur sehr kurze Zeitspannen zur Verfügung.

Der Echtzeit-Aspekt wird auch bei Online-Problemen deutlich, die sich bei der Steuerung automatischer Transportsysteme ergeben: Lange Rechenzeiten vermindern den Durchsatz im System. Transportsysteme sind in der Regel nicht im voraus (offline) zu optimieren, da zukünftige Transportaufträge beispielsweise für Lastenaufzüge oder Bediengeräte von Hochregallagern nicht bekannt sind und ausfallbedingte Staus nur selten rechtzeitig vorausgesehen werden.

Online-Transportaufgaben stellen sich weiterhin bei der Planung von Einsatzfahrzeugen, etwa bei der Zuordnung von Pannenhelfern zu liegengelassenen Kraftfahrzeugen. Auch hier sind Entscheidungen ohne Kenntnis zukünftiger Pannorte innerhalb kurzer Zeit erforderlich.

Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen

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

Kooperationspartner: Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft „Echtzeitoptimierung großer Systeme“

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich in den letzten Jahren die von Sleator und Tarjan [12] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [4, 5]). Der Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung wird mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung verglichen. Ein Algorithmus heißt *c-kompetitiv*, wenn für jede Eingabe seine „Kosten“ höchstens c -mal so groß wie die des optimalen Offline-Algorithmus sind. Die kompetitive Analyse ist eine *Worst-Case-Analyse* und in vielen Fällen übermäßig pessimistisch (vgl. *triviality barrier* in [5]). Sie liefert oft kaum Entscheidungshilfen, welche Algorithmen in der Praxis verwendet werden sollen.

Ziel des Projektes ist es, praxistaugliche mathematische Modelle für 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. Hauptziel ist es stets, Online-Algorithmen mit mathematisch beweisbarer Güte zu entwickeln. Es sollen hierbei auch neue Bewertungskonzepte für Online-Algorithmen hergeleitet werden, welche Schwächen der reinen kompetitiven Analyse vermeiden und für die Praxis aussagekräftiger sind.

Im allgemeinen Dial-a-Ride-Problem (OLDARP) müssen Objekte in einem metrischen Raum mit Hilfe von einem oder mehreren Servern transportiert werden. Einige Scheduling-Probleme und Varianten des *Traveling-Salesman-Problems* können auf OLDARP zurückgeführt werden (siehe z.B. [2, 9]). Für die Mini-

mierung der Gesamtfertigstellungszeit („makespan“) konnten wir im vergangenen Jahr einen kompetitiven Algorithmus finden, der die bestmögliche Kompetitivität von 2 besitzt [2]. Für die Minimierung der gewichteten Summe der Fertigstellungszeiten konnte ein 8-kompetitiver deterministischer Algorithmus gefunden werden, dessen randomisierte Variante 5.78-kompetitiv ist [8]. Bekannt war bis zu diesem Zeitpunkt nur ein 9-kompetitiver Algorithmus für einen Spezialfall des Problems.

Da für die Minimierung der maximalen oder durchschnittlichen Flußzeit für das OLDARP nachweislich keine kompetitiven Algorithmen – weder deterministisch noch randomisiert – existieren, wurde die Frage nach sinnvollen Einschränkungen der Eingabe in [7] und Alternativen zur kompetitiven Analyse behandelt. Hauptergebnis dieses Ansatzes ist eine Gütegarantie für die maximale und durchschnittliche Flußzeit für einen Online-Algorithmus unter sogenannter *vertretbarer Belastung*. Aufbauend auf diesem Ansatz konnten dann weitere Algorithmen mit Gütegarantien unter vertretbarer Belastung gefunden werden [6].

Ein Spezialfall von OLDARP ist das Online-Traveling Salesman Problem (OLTSP). Für das OLTSP auf der positiven reellen Achse konnten in [3] verbesserte Kompetitivitätsresultate unter natürlichen Einschränkungen an den Offline-Gegenspieler bewiesen werden.

Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze

Bearbeitet von: Sven O. Krumke, Diana Poensgen, Jörg Rambau

Kooperationspartner: DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin); T-Nova Deutsche Telekom Innovationsgesellschaft mbH (Berlin)

Durch die Glasfasertechnologie haben sich die Randbedingungen für Kommunikationsnetze erheblich geändert. *Wavelength Division Multiplexing* (WDM) ermöglicht eine Vervielfachung der gesendeten Datenmengen. Mehrere Signale können dabei gleichzeitig über eine Faser geschickt werden, indem sie auf verschiedenen Wellenlängen gesendet werden.

Zusätzlich erlaubt die Entwicklung rein optischer Switches, der *Optical Cross Connects*, das Durchleiten des Signals (in einer Wellenlänge) durch einen Knoten ohne opto-elektronische Konversion.

Der Netzbetreiber hat somit die Möglichkeit, Signale auch zwischen nicht benachbarten Knoten rein optisch zu schicken, d.h. einen sogenannten *Lichtweg* zwischen diesen Knoten zu installieren. Lichtwege bestehen aus einem Pfad physikalischer Verbindungen zusammen mit einer oder – in dem Fall, daß rein optische Wellenlängenkonversion möglich ist – mehreren Wellenlängen. Ist keine rein optische Wellenlängenkonversion möglich, dann darf ein Lichtweg nur eine einzige Wellenlänge benutzen. Die wichtigste Beschränkung besteht darin, daß auf einer Faser jede Wellenlänge nur für einen Lichtweg benutzt werden darf (*wavelength conflict constraint*).

In Zusammenarbeit mit der T-Nova, Innovationszentrum der Deutschen Telekom, und im Auftrag des DFN untersuchen wir die dynamische Konfiguration solcher optischen Netze. Gleichzeitig beschäftigen sich andere Mitarbeiter der Gruppe Optimierung des ZIB mit dem Problem der Planung und statischen Konfiguration dieser Netze (siehe Projekt „Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze“, Abschnitt 2.2.9).

Beim Problem der dynamischen Konfiguration liegt bereits eine statische Konfiguration vor, d. h. die Kapazitäten (Anzahl Fasern pro physikalischer Verbindung und Menge der verfügbaren Wellenlängen pro Faser) sind festgelegt, und ein Teil der Wellenlängen einer jeden Faser ist bereits durch Lichtwege belegt. Im Zeitverlauf kommen neue Verbindungsanfragen an, bestehende Verbindungen werden nicht mehr benötigt (Wellenlängen werden frei) und Ausfälle physikalischer Komponenten treten auf.

Der Netzbetreiber muß ohne Information über zukünftige Verbindungsanfragen oder Ausfälle entscheiden, ob eine neue Verbindungsanfrage bei aktueller Auslastung des Transportnetzes angenommen wird (*Call Admission*), und wenn ja, wie sie geroutet wird (*Routing and Wavelength Allocation*). Weiterhin muß für schnelles Rerouten ausgefallener Verbindungen gesorgt werden.

In diesem Projekt sollen verschiedene dynamische Algorithmen für das beschriebene Problem entwickelt und bzgl. ihrer Güte verglichen werden. Eine weitere Anforderung des Kooperationspartners besteht darin, Algorithmen zu entwerfen, die nicht auf zentral gespeicherte Informationen über den gesamten Netzzustand angewiesen sind.

Im Berichtszeitraum lag der Arbeitsschwerpunkt auf der Modellierung des Problems. Parallel dazu wurden erste Algorithmen unter stark vereinfachten Voraussetzungen entwickelt.

Echtzeitsteuerung von Aufzugssystemen

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 Aufzugssystemen 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 Aufzugssystemen ist der *Echtzeit-Aspekt*. Bei Auftreten einer neuen Anfrage steht nur eine sehr beschränkte Rechenzeit für die Bestimmung einer neuen Lösung zur Verfügung, und eine Reaktion des Systems auf die neue Situation muß schnell erfolgen, um den

Durchsatz im System nicht zu 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 sind wichtige Bausteine von Online-Algorithmen, die auf *Reoptimierung* basieren: der Aufzug wird nach einem Plan gesteuert, der bei jeder Änderung der Auftragslage neu als Optimum eines verwandten Offline-Optimierungsproblems berechnet wird.

Im vergangenen Jahr beschäftigten wir uns mit dem Steuerungsproblem für Aufzüge größerer Kapazität. Es war bekannt, daß das Problem bereits bei Kapazität 2 NP-schwer zu lösen ist. Wir konnten einen polynomialen Approximationsalgorithmus finden und für diesen eine Gütegarantie beweisen [10].

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 i. d. R. in existierenden Transportsystemen ihren Dienst verrichten (Abbildung 2.29).

Integrierte Echtzeit-Optimierung 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 Transportsysteme erfahren momentan im Zuge der Senkung von Produktionskosten eine immense Verbreitung. Methoden zur bestmöglichen Steuerung eines solchen Transportsystems sind daher von zentraler Bedeutung. Die immer größer werdende Komplexität der damit verbundenen Optimierungsprobleme wird durch größere Rechnerleistung nicht ausgeglichen, so daß neuartige Methoden zur Beherrschung der Transportsysteme unverzichtbar sind.

Ziel dieses Projektes ist es, echtzeitfähige Online-Optimierungsverfahren für *heterogene* Transportsysteme zu entwickeln. Untersucht werden beispielsweise Integrationseffekte beim Zusammenspiel von Vertikalförderern mit Hochregallagerbediengeräten, die von einem gemeinsamen Zubringerfördersystem bedient werden. (Paletten werden über Rollen- und Kettenförderbänder in den Förderturm verbracht; von da aus werden sie mit dem Vertikalfördergerät auf ihre Zieletage transportiert und evt. ins Hochregallager befördert.) Unser industrieller Partner, die Herlitz PBS AG, Berlin, stellt uns in diesem Zusammenhang Daten seines vollautomatischen Palettenfördersystems in Falkensee bei Berlin zur Verfügung.

Wir studierten im vergangenen Jahr eine komplett integrierte Optimierungsme-

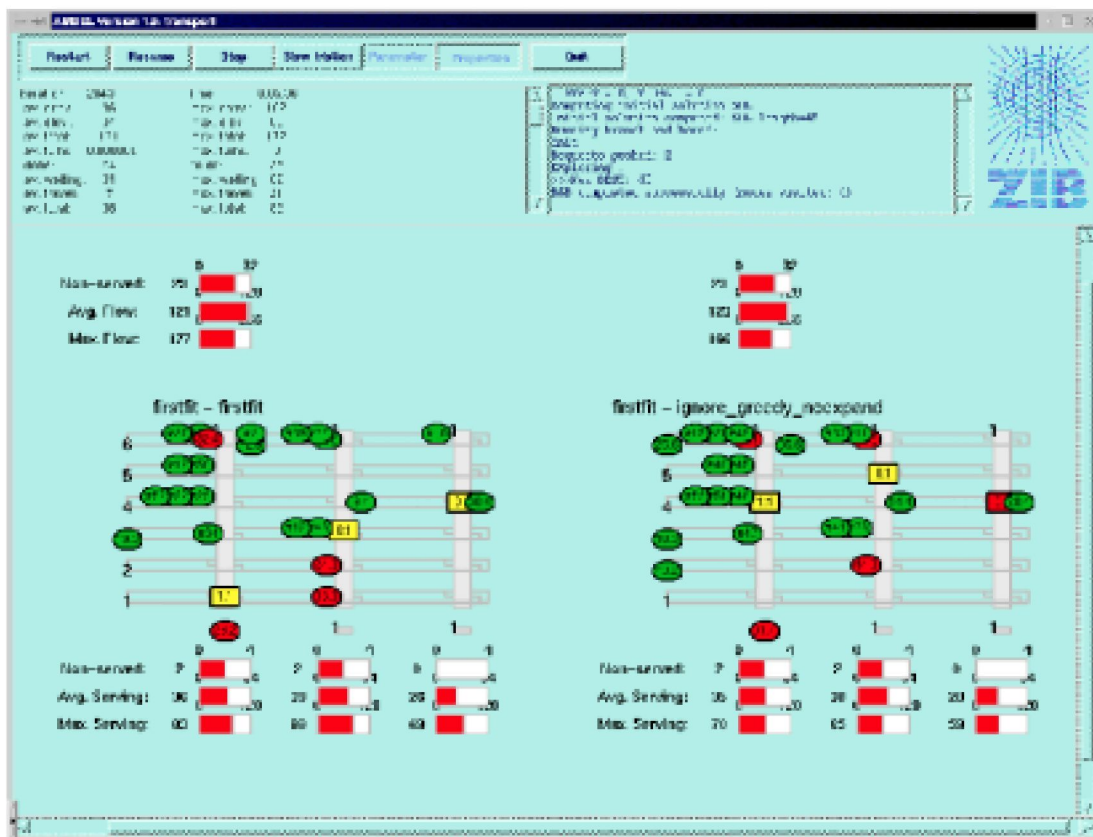


ABBILDUNG 2.29: Bildschirmdarstellung des Simulationsprogrammes für Aufzugssysteme.

thode von Zubringersystem und Vertikalförderern, die in Spezialfällen auf Multi-Server-Traveling-Salesman-Probleme mit Präzedenzrelationen (genannt m -cost-SOP) führt. Diese Problemklasse verallgemeinert sowohl das *Sequential-Ordering*-Problem (SOP) als auch das m -cost-*Asymmetric-Traveling-Salesman*-Problem (m -cost-ATSP).

Polyedrische Studien für die Formulierung als lineares ganzzahliges Programm haben ergeben, daß einige der bekannten Ungleichungen für das SOP und das m -cost-ATSP auf das m -cost-SOP verallgemeinert werden können. Kriterien für die Facetteneigenschaft einiger Ungleichungen konnten ebenfalls übertragen werden [11].

Ein darauf basierender Branch&Cut-Algorithmus konnte für das kombinierte Aufzug-Zubringer-System die Fertigstellungszeit im Durchschnitt um 50% gegenüber der nicht-integrierten Optimierung (erst Aufträge auf Aufzüge verteilen, dann Aufzüge steuern) reduzieren.

Um diese Ergebnisse für die Praxis nutzbar zu machen, müssen im weiteren Projektverlauf noch geeignete Online-Strategien gefunden werden, die Nutzen aus

einer guten Offline-Lösung ziehen können. Vielversprechende Ansätze liefern die neuen Algorithmen des vorstehend beschriebenen Projektes *Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen*, die sich unter sogenannter vertretbarer Belastung eine beweisbare Güte haben.

Online-Disposition von Fahrzeugen

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

Kooperationspartner: Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e.V. (ADAC)

In den fünf regionalen Pannenhilfeszentralen des ADAC erfolgt die Annahme von Pannemeldungen durch „Calltaker“ sowie die Disposition der Einsatzmittel (der ADAC-Flotte und externer Servicepartner). Bei der Einsatzplanung wird der Disponent derzeit durch das *PANDA*-Computer-System unterstützt, welches ihm neben den aktuellen Aufträgen die Position und den Status der ADAC Service-Mobile anzeigt. Die Zuordnung der Einsatzmittel zu den Aufträgen wird vom Disponenten manuell vorgenommen. Entscheidungen trifft der Disponent mit Hilfe von Intuition und Erfahrungswerten. Problematisch sind an dieser Situation folgende Aspekte:

- Die Qualität der Entscheidungen variiert stark mit dem Disponenten.
- Es ist selbst für erfahrene Disponenten nicht möglich, bei stärkerer Last global gute Zuordnungen zu treffen. Seine Übersicht beschränkt sich auf lokal vernünftige Zuordnungen (nach dem Greedy-Prinzip).
- Bei stärkerem Lastaufkommen sind die Disponenten oft überfordert. Es werden daher zusätzliche Disponenten benötigt.

Ziel im zu entwickelnden Dispositionsassistentensystem *DAISY* ist die optimierte Disposition der verfügbaren Einsatzmittel. Dabei soll die ADAC-Flotte so weit wie möglich ausgelastet werden. Die Dispositionsplanung besitzt in natürlicher Weise *Online-Charakter*: Ohne exakte Kenntnis der Zukunft müssen „vernünftige“ Entscheidungen getroffen werden. Entscheidungen können nur in begrenztem Maße revidiert werden (etwa durch Dispositionsrücknahme).

Ein weiteres Kennzeichen der Dispositionsplanung ist der *Echtzeit-Aspekt*. Bei Auftreten neuer Anfragen oder dem Ausfall von Einsatzmitteln steht nur eine kurze Zeit für die Bestimmung einer neuen Lösung zur Verfügung.

Publikationen

- [1] N. Ascheuer, *Amsel—a modelling and simulation environment library*, Online-Dokumentation unter <http://www.zib.de/ascheuer/AMSEL.html>.
- [2] N. Ascheuer, S. O. Krumke und J. Rambau, *Online dial-a-ride problems: Minimizing the completion time*, Proceedings of the 17th International Sym-

- posium on Theoretical Aspects of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Band 1770, Springer, 2000, S. 639–650.
- [3] 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, Band 1767, Springer, 2000, S. 137–149.
 - [4] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.
 - [5] A. Fiat und G. J. Woeginger (Hrsg.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Band 1442, Springer, 1998.
 - [6] B. Glück, *Online-Steuerungen automatischer Transportsysteme bei vertretbarer Belastung*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2000.
 - [7] 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, Band 1767, Springer, 2000, S. 125–136.
 - [8] S. O. Krumke, *News from the online traveling repairman*, Report 00-08, ZIB, 2000.
 - [9] S. O. Krumke und J. Rambau, *Online Optimierung*, Report 00-55, ZIB, 2000.
 - [10] S. O. Krumke, J. Rambau und S. Weider, *An approximation algorithm for the non-preemptive capacitated dial-a-ride problem*, Report 00-53, ZIB, 2000.
 - [11] M. Müller, *Online-Optimierung und Layout-Planung von Aufzugssystemen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2000.
 - [12] D. D. Sleator und R. E. Tarjan, *Amortized efficiency of list update and paging rules*, Communications of the ACM **28** (1985), Nr. 2, 202–208.

2.2.12 Verkehr

Die Optimierung von Verkehr ist ein langfristiges Forschungsthema am ZIB.

Das Umfeld stellt sich gemischt dar. Prinzipiell scheint sich die Verwendung mathematischer Optimierungsmethoden bei vielen kombinatorischen Fragestellungen der Verkehrsplanung geradezu aufzudrängen. Ganz anders sieht dagegen häufig die Praxis aus: In Planungskreisen herrscht vielfach große Skepsis gegenüber der Mathematik vor, die nur durch Kommunikation und Zusammenarbeit abgebaut werden kann.

Mit unserem aktuellen Projekt zur *Optimierung der Dienstplanung im Nahverkehr*, einem Nachfolger der Projekte zur *Optimierung der Fahrzeugeinsatzplanung des Berliner Behindertenfahrdienstes Telebus* und zur *Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung im Nahverkehr*, bearbeiten wir eine klassische Fragestellung. Unser Ziel ist dabei, ein leistungsfähiges Optimierungstool herzustellen, dieses in die betriebliche Praxis zu bringen und damit den Nutzen der mathematischen Optimierung exemplarisch zu belegen.

In der Zukunft wird der Schwerpunkt auf erweiterten Fragestellungen liegen. Durch Zusammenfassung mehrerer Planungsschritte und durch die Einbeziehung von Unsicherheit soll die Reichweite der Optimierungsmethoden vergrößert werden. Im Projekt *Management verteilter Lager* wird ein stochastisches Transportproblem untersucht, während im Projekt *Dynamische Disposition von Pannenhilfefahrzeugen* (siehe Schwerpunkt Online-Optimierung) ein Problem der Fahrzeugeinsatzplanung in Echtzeit behandelt wird. Im Rahmen eines Nachfolgeprojektes zur *Integrierten Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* (Öffentlicher Personennahverkehr) werden wir ab dem nächsten Jahr (wir berichten hier noch nicht darüber) die Möglichkeit einer Zusammenfassung von Umlauf- und Dienstplanung studieren.

Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Bei der Dienstplanung im ÖPNV geht es darum, einen Fahrzeugumlaufplan mit möglichst geringem Personalaufwand durchzuführen. Das Kernproblem besteht darin, einen (zunächst anonymen) Dienstplan aufzustellen, der sich aus verschiedenen, maßgeschneiderten Einzeldiensten zusammensetzt. Diese Art der Planung wird im Luftverkehr, bei der Bahn, in Krankenhäusern und, wie in unserem Projekt, im Nahverkehr verwendet. Typischerweise treten mehrere verschiedene Dienstarten auf (z. B. Frühdienst, Spätdienst, geteilter Dienst etc.), deren Zulässigkeit und Bewertung durch ein Regelwerk festgelegt ist, das sich aus einer betriebsindividuellen Mixtur gesetzlicher, tariflicher und betrieblicher Vorschriften zusammensetzt.

Unser Dienstplan-Optimierungssystem DS-OPT (Abbildung 2.30) basiert auf einem Set-Partitioning-Pfadüberdeckungsmodell für das Dienstplanungsproblem, das wir mit Spaltenerzeugungstechniken der ganzzahligen Optimierung bearbeiten. Wir zielen dabei nicht auf Optimalität, die nach unserer Meinung jenseits des heute Machbaren liegt, sondern auf eine approximative Lösung – das allerdings unter Einbeziehung sämtlicher planerischer Freiheitsgrade und ohne willkürliche Vereinfachungen. Dazu setzen wir in der entscheidenden algorithmischen



ABBILDUNG 2.30: Dienstplanoptimierung mit DS-OPT.

Komponente, den Spaltengeneratoren, eine neuartige Constrained-Shortest-Path-Lagrange-Technik ein, die die Bearbeitung sehr großer Instanzen mit 9 Dienstar-ten, 6.000 Dienstelementen und 2 Millionen expliziten Übergangsmöglichkeiten erlaubt (noch größere Datensätze sind bisher noch nicht aufgetreten). Das ent-spricht einer Gesamtplanung für einen mittleren Verkehrsbetrieb oder einer be-triebshofweisen Planung für einen Großbetrieb wie etwa die Berliner Verkehrsbe-triebe (BVG).

Damit lassen sich beachtliche Einsparungen erzielen. Optimierungsstudien für mittlere und große europäische Verkehrsbetriebe in den Bereichen Bus, Straßen-bahn und U-Bahn zeigten bei ansonsten mindestens gleicher Planungsqualität Einsparpotentiale von 3,5% bis teilweise über 10% der Personalkosten auf. Wir arbeiten derzeit noch an einer solchen Studie für die BVG.

DS-OPT wird bereits in dem Planungssystem MICROBUS II der IVU Traffic Technologies AG vermarktet. Erste Bestellungen deutscher Verkehrsbetriebe sind um die Jahreswende 2000/2001 erfolgt, Absichtserklärungen weiterer, auch aus dem europäischen Ausland liegen vor.

Übersichten zur Optimierung im Verkehr mit Bezug auf die Dienstplanung finden sich in [1] und [6]. Modellierungsaspekte zur Dienstplanung sind beschrieben in [4]. Eine Übersicht über DS-OPT findet sich in [2]. Eine detaillierte Beschreibung der mathematischen Ergebnisse gibt [3]. Im Zusammenhang damit untersucht [5] die approximative duale Lösung von Set-Partitioning Problemen. Die Arbeit [7] diskutiert Aspekte der Anwendung von DS-OPT.

Management verteilter Lager

Bearbeitet von: Christoph Helmberg, Nicole Kruse

Kooperationspartner: Fiege eCom GmbH & Co. KG, Herlitz PBS AG

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Unternehmen, die aus historischen oder produktionstechnischen Gründen Lagerhäuser an mehreren benachbarten Standorten betreiben, verfügen oft über einen eigenen LKW-Shuttledienst zur Umschichtung der Produktmengen zwischen den Lagern entsprechend dem Bedarf und den einzelnen Lagerkapazitäten. Dabei sind die notwendigen Transporte teilweise im vorhinein bekannt, teilweise kurzfristig und stochastischer Natur. Gesucht wird nun eine Umschichtung der Güter mit LKWs zwischen den Lagern, so daß alle Anfragen mit möglichst hoher Wahrscheinlichkeit zeitgerecht befriedigt werden können und die dabei anfallenden Fahrtkosten minimiert werden.

Konkret werden wir diesen Problemkreis an folgendem Fallbeispiel untersuchen. Unser Projektpartner, die Fiege eCom GmbH & Co. KG, betreibt in Berlin und Umgebung Lagerhäuser an drei verschiedenen Standorten (Falkensee, Spandau, Tegel) und bietet als Dienstleistung Kommissionierung und Versand von Produkten an. Derzeit größter Kunde ist die Herlitz PBS AG, für die ca. 40000 Artikel in produktreinen Paletten in Hochregallagern und in geringen Mengen in Kleinartikellagern vorrätig gehalten werden. Im Versandzentrum Falkensee reicht die Lagerkapazität nicht aus, um alle Produkte im Hochregallager bereit zu halten. In den Lagern Spandau und Tegel ist die Kapazität kein Problem. Fiege eCom garantiert, daß die Ware innerhalb von 24 Stunden nach Bestellung ausgeliefert werden kann. Es ist Aufgabe der Logistik, Auslagerungsanfragen an jedem Ort zeitgerecht zu bedienen. Die Verteilung der Güter auf die Lager ist ihr dabei freigestellt. Zur Zeit werden die Umschichtungen per Hand von Experten geplant. Fünf Lastkraftwagen stehen zum Transport zur Verfügung.

Beginnend mit Januar 2001 wird dieses neue Projekt vom BMBF innerhalb des Förderprogramms *Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung* unterstützt. Im Rahmen des Projekts sollen stochastische Ein- und Auslagerungsmodelle, darauf aufbauend Optimierungsmodelle und Lösungsverfahren entwickelt werden.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Optimization of transportation systems*, Preprint SC 98-09, ZIB, 1998.
- [2] R. Borndörfer und A. Löbel, *Dienstplanoptimierung im ÖPNV*. In Arbeitskreis Mathematik in Forschung und Praxis, 18. Symposium "Modellierung und Simulation von Verkehr", Bad Honnef, 18./19.11.1999, Report Nr. 463, Schriftenreihe des Fachbereichs Mathematik der Gerhard-Mercator-

Universität Duisburg (2000), 30–34.

- [3] ———, *Scheduling duties by adaptive column generation*, Report 01-02, ZIB, 2001.
- [4] 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.
- [5] C.-Y. Byun, *Lower bounds for large-scale set partitioning problems*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2001.
- [6] M. Grötschel, *Verkehrsplanung: Bessere Lösungen mit Mathematik*, Preprint SC 99-54, ZIB, 1999. In *Forschungspolitische Dialoge in Berlin: Mathematik – Die verborgene Schlüsseltechnologie* (1999), 11–22.
- [7] M. Kammler, *Optimierungsverfahren für Dienstpläne im ÖV*, *Nahverkehrspraxis* 7/8 (2000), 22.

2.2.13 Grid Computing

Grid Testbeds

Bearbeitet von: André Merzky, Alexander Reinefeld, Florian Schintke, Thomas Steinke, Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Albert–Einstein–Institut Potsdam (CACTUS Projekt); NCSA Chicago (Globus Projekt), ISI Los Angeles (Globus Projekt); European Grid Forum (EGrid), Global Grid Forum (GGF); CERN (DataGrid Projekt)

Mit der wachsenden globalen Vernetzung gewinnt das *Grid Computing* zunehmend an Bedeutung: Computer werden nicht mehr singular sondern zunehmend im überregionalen Lastverbund betrieben. Dies allein ist aber noch kein Grid Computing – das Grid Computing geht weit über das bloße Zusammenschalten von Computern hinaus. Es bietet durch die kooperative Nutzung geographisch verteilter Datensysteme, Verbindungsnetzwerke, Software, Dienste und Spezialhardware die notwendige Infrastruktur, auf der neue verteilte Arbeitsformen entstehen werden.

Da das Grid Computing *per definitionem* eine kollaborative Aktivität ist, waren wir im Berichtszeitraum aktiv an der Etablierung globaler Forschungsverbunde beteiligt. So haben wir im Januar 2000 am ZIB im Rahmen eines vorbereitenden Workshops zusammen mit befreundeten europäischen Instituten das Europäische Grid Forum (EGrid) gegründet, an dem führende Forschungsgruppen aus allen europäischen Ländern beteiligt sind. EGrid (<http://www.egrid.org>) ist ein offenes Forum, das sich die Förderung und den Einsatz von Grid Technologien zur koordinierten, effizienten Nutzung vernetzter Hochleistungsrechner zum

Ziel gesetzt hat. Die über zweihundert *EGrid*-Forscher arbeiten eng mit den einschlägigen amerikanischen Projektgruppen (Globus, Condor, CACTUS, Legion) und einigen Firmen zusammen. Es existieren Arbeitsgruppen zu den Themen Data Management, Resource Management, Programming Models, Testbeds und Performance Analysis. Eines der herausragenden Ereignisse war der von uns mitorganisierte *First European Grid Workshop* des *EGrid*-Forums, der im April 2000 in Poznan (Polen) stattfand [1].

Parallel dazu verliefen unsere Arbeiten zur Etablierung einer *EGrid*-Testumgebung, in der parallele Hochleistungsanwendungen völlig ortstransparent auf weltweit verteilten Supercomputern ausgeführt werden können. Auf der internationalen Supercomputing-Konferenz in Dallas (USA) hat das *EGrid*-Forum mit unserer Unterstützung eine verteilte Anwendung zur Berechnung der Einsteinschen Relativitätsgleichungen vorgestellt, die europaweit verteilt auf Supercomputern in Berlin, Potsdam, Paderborn, Köln, Stuttgart, Sankt Augustin, Amsterdam, Manchester, Poznan, Brno, Budapest und Lecce ablief und dabei von einem mobilen Personal Digital Assistant (PDA) direkt vom Konferenzort in Dallas (USA) gesteuert wurde. Ein adaptiver Lastverteilungsalgorithmus hat für den globalen Lastausgleich und die optimale Nutzung der verfügbaren Computer gesorgt [2].

Gegen Ende des Jahres 2000 haben sich einige der *EGrid*-Arbeitsgruppen mit den korrespondierenden Gruppen des amerikanischen *Grid Forum* zum sog. *Global Grid Forum (GGF)* zusammengeschlossen, das im März 2001 erstmals in Europa tagt.

Auch für komplexe Anwendungen der Chemie wird das Grid Computing zunehmend relevant. Die EU COST Action D 23 *METACHEM (Metalaboratories for Complex Computational Applications in Chemistry)* hat die Schaffung von sog. Meta-Laboratorien in Europa zum Ziel, in denen sowohl verteilte Hardware- und Software-Ressourcen als auch die in den beteiligten Institutionen vorhandene fachliche Expertise gebündelt werden soll, um ressourcenintensive Simulationen für chemische Fragestellungen durchführen zu können. Dazu sollen Lösungen für rechentechnische Infrastrukturen geschaffen werden, um kosteneffektiv geographisch verteiltes Rechnen zu bewerkstelligen. Das ZIB ist Mitbegründer von *METACHEM*, Vice Chair des Management-Komitees sowie nationaler Kontaktpunkt in Deutschland.

UNICORE Plus - Uniform Interface for Computer Resources

Bearbeitet von: George Din, Alexander Reinefeld, Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: FZ Jülich (Koordinator); DWD Offenbach; ECMWF Reading; LRZ München; PC² Paderborn; RUKA Karlsruhe; RUS Stuttgart; Fujitsu-Siemens; Hewlett-Packard; Hitachi; IBM; NEC; Pallas; SGI/CRAY; SUN

Microsystems

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

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 und ermöglicht die plattformunabhängige Kontrolle verteilter Jobs über sichere Kommunikations- und Authentifizierungsverfahren. Dazu werden moderne Web-Techniken, wie z.B. `https`, signed applets und Zertifikate eingesetzt.

Das ZIB ist in UNICORE für das Arbeitspaket „Ressourcenbeschreibung und Ressourcensteuerung“ verantwortlich [3]. Unser Grundansatz besteht darin, unter Ressourcen nicht wie im traditionellen Ansatz lediglich abstrakte Rechenkapazitäten und Speichergrößen zu verstehen, sondern höherwertige Anwendungsdienste. Zur Umsetzung dieses Ansatzes haben wir ein Softwarepaket zur weitgehend automatisierten Erzeugung grafischer Benutzeroberflächen für UNICORE-Eingabeformulare entwickelt. Das Softwarepaket arbeitet mit diversen Tools (XML, Java Swing, u.s.w.) auf einer Meta-Ebene, die es dem Benutzer erlaubt, mittels Drag-and-Drop-Techniken eigene, auf seine speziellen Bedürfnisse abgestimmte Benutzer-Interfaces (sog. Formulare) zu erstellen. Die Erzeugung der Formulare mit den zugehörigen Backend-Funktionen geht relativ schnell, wodurch es erstmals möglich ist, auch für kleinere Benutzergruppen speziell angepaßte Interfaces zu erstellen. Formulare für typische Anwendungspakete wie z.B. Gaussian oder MOLPRO lassen sich in ein bis zwei Stunden erstellen. Die darunter liegende Ressourcen-Steuerung basiert auf dem XML-Standard.

Publikationen

- [1] A. Merzky, A. Reinefeld, *High-Performance Computing on German Gigabit WANs*. ISTmus 2000 – Research and Development for the Information Society, Poznan 2000, pp. 39-43.
- [2] R. Baraglia, D. Laforenza, A. Keller, A. Reinefeld, *RsdEditor: A Graphical User Interface for Specifying Metacomputer Components*. Procs. of the 9th Heterogeneous Computing Workshop at IPDPS, May 2000 Cancun, Mexico.
- [3] A. Reinefeld, H. Stüben, T. Steinke, W. Baumann, *Models for Specifying Distributed Computer Resources in UNICORE*, in: ISTmus 2000 — Research and Development for the Information Society, Institut Informatyki Politechnika Poznańska, 2000, 313-320.

2.2.14 Innovative Systemnetzwerke und Cluster Computing

Linux-Cluster

Bearbeitet von: Alexander Reinefeld, Jens Simon, Florian Schintke

Kooperationspartner: FU-Berlin; Universität Klagenfurt; Paderborn Center for Parallel Computing

Für unsere Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der schnellen System-Interconnects haben wir in Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Informatik der Freien Universität einen *Beowulf*-Cluster mit zehn Intel Pentium III-Prozessoren aufgebaut, der unter dem Betriebssystem Linux betrieben wird. Mit seiner geringen Leistung wird er nicht für Produktionsläufe eingesetzt, sondern dient primär als Testsystem für die Erprobung und Leistungsmessung eines parallelen Betriebssystems (MOSIX), eines Lastausgleichsverfahrens (MPL/Legion), eines Ressourcen-Managementsystems (PBS) und einer von Studenten entwickelten fehlertoleranten Managementsoftware. Für parallele Anwendungen sind die Kommunikationsbibliotheken MPI-CH und PVM installiert worden. Da der Cluster relativ unproblematisch hoch- und heruntergefahren werden kann, haben wir ihn auch im oben beschriebenen *EGrid*-Testbed und für unsere Arbeiten am Globus-Managementssystem eingesetzt. Als nächste Ausbaustufe ist die Erweiterung um Gigabit-Ethernet-Karten geplant, auf denen das *Scheduled Transfer*-Protokoll implementiert werden soll. Erste Messungen mit zwei Karten sind sehr erfolgversprechend verlaufen: ST bietet bei geringfügig reduzierter Latenzzeit eine höhere Prozessorleistung, da der Protokollstack im Vergleich zu TCP kleiner ist.

WAP-Dienste für die CRAY T3E

Bearbeitet von: Sebastian Heidl, Jens Simon, Ralf Staudemeyer

Die zunehmende Verfügbarkeit von mobilen Geräten, mit denen ein Zugang ins Internet möglich ist, bringt auch eine steigende Nachfrage nach Informationsdiensten für diese Art von Clients mit sich. Im Rahmen dieses Projekts wurde ein WAP-Interface für die CRAY T3E entwickelt, das es den Nutzern ermöglicht, über ein mobiles, WAP-fähiges Gerät Informationen zur Betriebsbereitschaft und Auslastung des Hochleistungsrechners, sowie Informationen zu den in Auftrag gegebenen Rechenjobs abzurufen.

Das Projekt hat gezeigt, daß die Bereitstellung der gleichen Informationen für unterschiedliche Arten von Clients (WWW-Browser → HTML, WAP-Browser → WML) durch die Verwendung von XML als internes Datenformat problemlos möglich ist. Auf Grund von Sicherheitsbedenken mußten wir zunächst auf die Möglichkeit eines interaktiven Zugriffs (z.B. um neue Rechenjobs zu starten) verzichten. Zudem ist die Bereitstellung des WAP-Informationsdienstes auf Grund von Kompatibilitätsproblemen (verschiedene Gateways, verschiedene WAP-Browser) mit erheblichem Aufwand verbunden. An dieser Stelle besteht

noch Handlungsbedarf seitens der Hersteller. Auf der Basis der gesammelten Erfahrungen wird es möglich sein, schnell auf neu angebotene Dienste für mobile Anwender zu reagieren und diese den ZIB-Anwendern in kürzester Zeit anzubieten.

Publikationen

- [1] A. Keller, A. Reinefeld. *Anatomy of a Resource Management System for HPC-Clusters*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Report 00-38, ZIB, 2000.
- [2] Sebastian Heidl, Ralf Staudemeyer, *Implementation von WAP-Diensten für die SGI/CRAY T3E des ZIB*, Konrad-Zuse-Zentrum Berlin, Report 00-41, ZIB, 2000.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Ralf Borndörfer

- Dissertationspreis der Gesellschaft für Operations Research (GOR)

Peter Deuffhard

- Ehrendoktor der Universität Genf

Karin Gatermann

- Heisenberg-Stipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

Frank Lutz

- Richard-Rado-Dissertationspreis für Diskrete Mathematik 2000 der Fachgruppe Diskrete Mathematik der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV)

Alexander Reinefeld

- Ruf auf einen Canada Research Chair an die Carleton University Ottawa (Dezember 2000)

Wissenschaftliche Dienstleistungen

3.1 Überblick

Dieses Jahr war für den Arbeitsbereich Wissenschaftliche Dienstleistungen ein außerordentlich erfreuliches Jahr, in erster Linie wegen der Außenwirkung seiner Projekte KOBV und Math-Net, sowie in seinen Aktivitäten im Museumsbereich.

KOBV: Das Projekt “Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg” (KOBV) konnte zum Jahresende mit großem Erfolg abgeschlossen werden. Es wird nun eine KOBV-Zentrale eingerichtet, die in das ZIB integriert ist. Die KOBV-Zentrale ist dann Teil der Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme des Bereiches Scientific Computing des ZIB. Teilnehmer am KOBV sind Bibliotheken aller Sparten und Subverbände aus der Region Berlin-Brandenburg.

Erklärtes Ziel der Landesregierungen in Berlin und Brandenburg ist es, die in ihrer Dichte und Vielfalt in Deutschland einmalige Bibliothekslandschaft mit rund 1000 Bibliotheken in der Region den besonderen Bedürfnissen des Wissenschafts- und Wirtschaftsstandortes Berlin-Brandenburg anzupassen. Technischer Kern des KOBV-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. In der Region soll ein leistungsfähiges und an den innovativen Möglichkeiten des Internets orientiertes Informationssystem entstehen, das seinen regionalen, ebenso wie seinen nationalen und internationalen Nutzern im World Wide Web zur Verfügung steht. Bis zum Ende des Berichtszeitraums ist mit der KOBV-Suchmaschine eine offene Plattform geschaffen worden, auf der weitere Entwicklungen aufsetzen können.

Math-Net: Das Math-Net-Projekt geht seiner Internationalisierung entgegen. Auf der Grundlage der Aktivitäten in der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) und der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften überträgt es nun seine Erfahrungen in den Bereich der International Mathematical Union (IMU). Die technischen Mittel werden in einem vom BMBF geförderten Cluster-Projekt “Content Analysis, Retrieval und Metadata” (CARMEN) erarbeitet, das

u. a. ein verteiltes Internet-Informationssystem der nächsten Generation (Harvest N.G.) entwickelt und an dem sich das ZIB von Beginn an beteiligte.

Ziel des Math-Net-Projektes ist nach wie vor der Aufbau eines kostengünstigen und nutzergesteuerten - nun international operierenden - Informationssystems, das dem Wissenschaftler an seinem Arbeitsplatz den direkten und effizienten Zugriff auf aktuelle und qualitativ hochwertige Information ermöglicht, auf Preprints und elektronische Publikationen, auf Abstracts und Referate, auf Software- und Datensammlungen und auf Information zu Personen und Projekten aus der Mathematik etc. Bezüglich der Kommunikation inhaltlicher Daten und Strukturen - Volltexten und Metadaten - orientiert sich das Projekt an den offenen Protokollen des Internet und den sich noch entwickelnden Dokumentenstrukturen des Web der nächsten Generation, z.B. an der Extended Markup Language (XML) und dem Resource Description Framework (RDF), deren Definition vom World Wide Web-Konsortium betrieben wird.

Museumsprojekt: Das Projekt "Informationstechnische Werkzeuge für Museen" ("Museumsprojekt") steht in der deutschen Museumslandschaft bisher einzigartig da, indem es seine service-orientierten Entwicklungen von Organisations- und Multimediawerkzeugen an den Bedürfnissen einer Vielzahl auch kleinerer Museen ausrichtet und ihnen in einer Reihe von Projekten die Nutzung moderner Informationstechnik erschließt – auch in diesem Jahr. Dabei sichert das Museumsprojekt die Relevanz dieser Arbeit durch engen Kontakt zu nationalen und internationalen Gremien des Museumsbereiches ab, wie z.B. durch die Zusammenarbeit mit der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und durch Kooperation im International Committee for Documentation of the International Council of Museums (CIDOC).

Im Auftrag der Staatlichen Museen in Berlin - Stiftung Preußischer Kulturbesitz – und in Kooperation mit dem in Berlin beheimateten Institut für Museumskunde entwickelt das Museumsprojekt Werkzeuge für die Rationalisierung der täglichen Arbeit in Museen, von speziellen Datenbanken für kleinere Museen bis hin zu integrierten Web-Servern für Multimediademonstrationen. Das bekannteste Beispiel hierfür ist der Server des Deutschen Historischen Museums, bei dessen Ausgestaltung das Museumsprojekt auch inhaltlich mitgewirkt hat.

Ausführlichere Beschreibungen der Schwerpunkte des Arbeitsbereiches Wissenschaftliche Dienstleistungen folgen im Anschluß.

REDUCE: Die Weiterentwicklung und Pflege des für den professionellen Einsatz bestimmten Computeralgebra-Systems REDUCE in Zusammenarbeit mit nationalen und internationalen Arbeitsgruppen liegt weiterhin in den Händen von ZIB-Mitarbeitern. Eine verbesserte Online-Hilfe für Benutzer sowie die Unterstützung von Standard-Dokumenten-Formaten wie MathML und OpenMath sind Kernpunkte der künftigen Arbeiten.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch

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

Der KOBV ist mit dem Ziel angetreten, in der Region Berlin-Brandenburg ein umfassendes Spektrum an nutzerorientierten Dienstleistungen aufzubauen und ständig weiter auszubauen. Mit der Inbetriebnahme der KOBV-Suchmaschine, dem virtuellen Katalog der regionalen Bestände, hat die KOBV-Projektgruppe im November 1999 den technischen Grundstein gelegt, um dieses Ziel zu erreichen: Nutzer können nun rund um die Uhr an ihrem Arbeitsplatz oder am heimischen PC in den Beständen der regionalen Bibliotheken recherchieren.

Die Projektgruppe hat die KOBV-Suchmaschine über den gesamten Berichtszeitraum hinweg als Prototypen und als Dienstleistung für Nutzer und KOBV-Bibliotheken erfolgreich eingesetzt. Schwerpunkt der Bemühungen war es, möglichst frühzeitig, noch vor dem Ende des Projektes im Dezember 2000, konkrete Erfahrungen zu gewinnen, die sich in eine zweite Entwicklungsstufe der KOBV-Suchmaschine technisch umsetzen lassen. Mit Hilfe der KOBV-Suchmaschine hat die KOBV-Projektgruppe im Berichtszeitraum die desolante Nachweissituation in der Region entscheidend verbessern können. Bis August 2000 sind – mit Ausnahme von drei Einrichtungen – die Bibliotheken sämtlicher KOBV-Projektpartner in die KOBV-Suchmaschine integriert worden. Damit können die Nutzer am Ende des Berichtszeitraums auf einen großen Teil der in der Region nachgewiesenen elektronischen Bestände zugreifen – bedauerlicherweise allerdings noch nicht auf die Bestände der Staatsbibliothek –, da diese noch kein lokales Bibliothekssystem mit OPAC-Komponente im Einsatz hatte. Über den Kreis der KOBV-Projektpartner hinaus hat die KOBV-Projektgruppe zwei weitere Bibliotheken und einen Bibliotheksverbund als sogenannte Beta-Tester in die KOBV-Suchmaschine integriert. Die Zugriffszahlen zeigen, daß die KOBV-Suchmaschine von den Nutzern und von den Bibliothekaren angenommen wird: Wöchentlich greifen ca. 20.000 Nutzer direkt aus der Region und weitere ca.

80.000 Nutzer durch überregionale Vermittlung über die KOBV-Suchmaschine auf die Bibliotheken zu.

Parallel zu den betrieblichen Arbeiten hat die KOBV-Projektgruppe im Berichtszeitraum mit der Firma Ex Libris die dritte Phase der KOBV-Suchmaschine konzipiert und mit der Realisierung begonnen. Phase drei umfaßt im wesentlichen Web-Funktionalitäten mit verbesserten und erweiterten Nutzerdiensten. Für kurzzeitige Irritation im ZIB hat dabei die Ankündigung der Firma gesorgt, die KOBV-Suchmaschine in ihrer bisherigen Form nicht weiter zu entwickeln, sondern die Bestandteile künftig in drei unabhängigen kommerziellen Produkten auf den Markt zu bringen. Bis Ende des Berichtszeitraumes konnte mit Ex Libris geklärt werden, daß die Firma ihre vollen vertraglichen Verpflichtungen auf die "neue" KOBV-Suchmaschine überträgt, die künftig die drei Ex Libris-Produkte MetaLib, MetaIndex (den Gemeinsamen Index) und Aleph500 für den Fremd- und Normdatenserver umfaßt. Damit hat die KOBV-Projektgruppe ihr ehrgeiziges Ziel erreicht, eine innovative und realistische Produktidee "in die Welt zu setzen", die sich dadurch als lebensfähig erweist, daß sie von einem kommerziellen Softwarehaus aufgegriffen, vermarktet und weitergeführt werden kann. Leider hat sich die Auslieferung entgegen den ursprünglichen Planungen verzögert, so daß die zweite Version der KOBV-Suchmaschine im Berichtszeitraum noch nicht in Betrieb genommen werden konnte.

Zu Beginn des Projektes war keineswegs sicher, daß sich die innovative und neuartige Idee eines dezentralen und technisch heterogenen Bibliotheksverbundes auf der Basis des Internet realisieren und langfristig umsetzen läßt. Heute steht fest: Die KOBV-Bibliotheken sind im Internet miteinander vernetzt und die Daten der KOBV-Suchmaschine sind mit den Katalogen der KOBV-Bibliotheken verlinkt. Die KOBV-Suchmaschine realisiert die Verteilte Suche und den Gemeinsamen Index; für Bibliotheken steht zusätzlich eine Sequentiell Verteilte Suche bereit (Prototyp). Ex Libris führt ein neues Produkt MetaLib ein, mit dem zum Berichtszeitpunkt eine neue Version der Verteilten Suche und erweiterte Web-Dienste für Nutzer als zweite Stufe der KOBV-Suchmaschine realisiert werden.

Nach rund einjähriger Betriebsphase des Bibliothekssystems ALEPH 500, Version 12.1, ist im Berichtszeitraum das gemeinsame Abnahmeverfahren der fünf Berliner Konsortialpartner, FU Berlin, HU, HdK Berlin, TU Berlin und ZIB, Ende September zu einem positiven Abschluß gebracht worden. Bereits zum Zeitpunkt der Inbetriebnahme der KOBV-Suchmaschine im November 1999 war absehbar, daß das Projekt bis Ende 2000 erfolgreich zum Abschluß gebracht werden kann. Unter Mitwirkung des ZIB ist im Berichtszeitraum die Institutionalisierung weiter vorangetrieben worden. Aufgrund der positiven Erfahrungen während des Projektphase hat sich das Steuerungsgremium einstimmig dafür ausgesprochen, die KOBV-Zentrale dauerhaft einzurichten und am ZIB anzusiedeln. Verwaltungsrat und Geschäftsleitung des ZIB erklärten sich dazu – auch vor dem Hintergrund

des gesetzlichen Auftrages – unter der Bedingung bereit, daß neben dem Betriebsbereich ein im personellen Bereich grundfinanzierter Entwicklungsbereich eingerichtet wird, der die permanente Weiterentwicklung des KOBV-Konzeptes unter Berücksichtigung neuester technologischer Entwicklungen garantieren soll. Zunächst für vier Jahre soll die KOBV-Zentrale am ZIB angegliedert werden. Eine Evaluierung nach drei Jahren soll zeigen, ob die Konzeption des KOBV und die Ansiedlung der KOBV-Zentrale am ZIB ihre Bestätigung finden.

Zum Ende des Berichtszeitraums ist das Projekt KOBV dank einer erheblichen gemeinsamen Kraftanstrengung aller Beteiligten mit großem Erfolg abgeschlossen und die Aufgabe, die KOBV-Zentrale aufzubauen, an das ZIB übertragen worden.

Publikationen

- [1] J. Lügger: *Über Suchmaschinen, Verbände und die Integration von Informationsangeboten : Teil I: KOBV-Suchmaschine und Math-Net*, in ABI Technik 20 (2000), Heft 2, S. 132 - 156.
- [2] B. Rusch: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Erste Erfahrungen im Produktionsbetrieb*. In: Information und Öffentlichkeit: 1. Gemeinsamer Kongreß der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e.V. (BDB) und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e.V. (DGI), Leipzig, 20.-23. März 2000, hrsg. von Georg Ruppelt und Horst Neisser. Wiesbaden: 2000, 301-308.

3.2.2 Math-Net - ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) der International Mathematical Union (IMU); Fachgruppe "Information und Kommunikation" der Deutschen Mathematiker-Vereinigung/Österreichischen Mathematischen Gesellschaft

Die IMU setzt sich aktiv für die Verbesserung der Informationsversorgung in der Mathematik ein. Math-Net ist ein verteiltes Informations- und Kommunikationssystem (IuK-System) in der Mathematik, das von der mathematischen Gemeinschaft initiiert und aufgebaut wird. Math-Net hat eine Schlüsselrolle beim Aufbau innovativer und nutzergesteuerter IuK-Systeme in der Mathematik. Die Math-Net Aktivität setzt auf das im Math-Net Projekt in Deutschland erarbeitete Modell auf.

Im Jahr 2000 hat die IMU die Math-Net Charter¹ verabschiedet, in der die wesentlichen Ziele, die Prinzipien und die Organisationsstruktur des Math-Net fest-

¹<http://www.math-net.org/charter>

geschrieben sind. Zudem wurden wichtige organisatorische und technische Grundlagen für das Math-Net geschaffen:

- Aufbau des Technical Advisory Boards des Math-Net
- Vorbereitung erster Standards (insbesondere die Weiterentwicklung des Konzepts der Math-Net Page als strukturierter Einstieg in das Informationsangebot mathematischer Institutionen)
- Beginn bilateraler Kooperationen (z.B. Rußland/Deutschland, UK/Deutschland)
- Verstärkung der Öffentlichkeitsarbeit

In Deutschland haben sich die Math-Net Aktivitäten im vergangenen Jahr konzentriert auf

- die Konsolidierung der organisatorischen Basis des Math-Net in Deutschland:
 - Aufbau der Math-Net Steering Group
 - Stärkung der Regionalstruktur (Einrichtung von Math-Net Knoten)
- den Ausbau der Math-Net Dienste, Entwicklung neuer Werkzeuge zur Erschließung bestimmter Dokumentklassen, die auf die wesentlichen internationalen Entwicklungen aufsetzen (insbesondere für Preprints, Personendaten und die Math-Net Page)
- die Standardisierung der Regionaldienste
- die Erstellung von Werkzeugen für das Management verteilter Informationssysteme (z.B. Monitoring zur Kontrolle der verschiedenen Komponenten innerhalb des Math-Net)
- die Verbesserung der Dokumentation der technischen Konzepte und Werkzeuge, die im Math-Net benutzt oder entwickelt werden
- die Unterstützung der Internationalisierung des Math-Net.

Kritisch ist anzumerken, dass nur wenige Institutionen Math-Net Dienste anbieten. Auch die notwendige Aktualisierung der lokalen Informationsangebote sowie die Erschließung durch Metadaten wird nicht von allen mathematischen Fachbereichen kontinuierlich geleistet.

Das ZIB hat sich sowohl auf nationaler als auch auf internationaler Ebene stark für das Math-Net engagiert.

Die DMV ist Gründungsmitglied der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften in Deutschland. Kompatibilität und Interoperabilität wissenschaftlicher Informationssysteme sind eine Grundvoraussetzung für den Aufbau verteilter Informationssysteme in den Wissenschaften. Die DMV hat sich an der IuK-Initiative in vielfältiger Form beteiligt, u.a. durch

- aktive Mitarbeit in den Gremien der IuK-Initiative (u.a im Executive Board, in der IuK-Kommission und in den Programmkomitees der IuK-Tagungen)
- Beiträge zur konzeptionellen Weiterentwicklung der IuK-Initiative
- die Pflege des Servers der IuK-Initiative
- die federführende Gestaltung der Arbeitsgruppe "Metadaten und Klassifikation"
- die Mitarbeit in internationalen Initiativen (wie etwa der DC Initiative).

Die IuK-Initiative erhält gegenwärtig keine finanzielle Förderung und Unterstützung, so daß die Wirkung beschränkt ist.

Die DMV hält dennoch die IuK-Initiative der Fachgesellschaften für strategisch wichtig und wird den Aufbau fachübergreifender Informationssysteme weiterhin unterstützen.

Publikationen

- [1] W. Sperber, W. Dalitz: *Portale, Search Engines and Math-Net, nfd Information - Wissenschaft und Praxis, 51. Jahrgang, Nr. 6, September 2000, 359-263.*

3.2.3 Global Info: CARMEN

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Wolfram Sperber, Winfried Neun

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Informationssysteme und -dienste im Internet unterliegen weiterhin einer stürmischen technischen Entwicklung. Dabei steht heute nicht mehr so sehr der quantitative, sondern der qualitative Aspekt im Vordergrund. Gleichwohl muß die Einbindung aller relevanten Information durch geeignete technische Weiterentwicklung, wie das Zusammenführen und die Suche über verteilte Datenbestände Rechnung getragen werden.

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.

Das CARMEN-Projekt (Content Analysis, Retrieval and MetaData: Effective Networking – AP7: Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten) mit seinen insgesamt 9 Teilprojekten ist für das Math-Net die Basis, neue Methoden und Verfahren zu entwickeln und zu adaptieren.

Der Anspruch, qualitativ hochwertige Dokumente im Web zu finden, fängt mit der Erstellung und der lokalen Bereitstellung von WWW-gerechten Dokumenten an. Zunehmend werden heute für bestimmte hochwertige Dokumente, wie Preprints, Metadaten bereitgestellt.

Bei der Erstellung setzt sich jetzt auch in diesem Bereich die von der SGML-Gemeinde schon seit langem propagierte Forderung durch, Struktur und Inhalt von Dokumenten zu trennen.

Es zeichnet sich ab, dass die extended Markup Language XML das bevorzugte Dokumentenformat im WWW sein wird. XML ermöglicht die Definition eigener Strukturen, die normalerweise über XML-Elemente beschrieben werden.

Bei den modernen Konzepten zur Behandlung von Metadaten ist das Resource Description Framework (RDF) wegweisend. In Kombination mit XML hat man damit heute die Möglichkeit,

- Dokumente zu strukturieren,
- Metadaten in standardisierter Weise zu erzeugen,
- verteilten Daten zusammenzuführen,
- sowie weitreichende Retrievalmöglichkeiten.

Im Projekt CARMEN wird ein integriertes Hypertext- und Retrievalsystem (HyREX) für XML-Dokumente entwickelt, das für verteilte, heterogene Umgebungen geeignet ist. Das System soll eine Reihe von Such- und Browsing-Strategien unterstützen und die Suche sowohl in Metadaten als auch in Volltexten erlauben. Hierfür werden die Metadaten zentral gehalten, und es wird ein zentraler Index für Retrieval und Navigation verwaltet. Die Volltextdokumente selbst bleiben jedoch weiter an ihrem ursprünglichen Ort. Eine Gathering-Komponente erlaubt das Absuchen relevanter WWW-Sites, wobei neue Metadatensätze oder Volltextdokumente zurückgeliefert werden.

Im Zuge der fortschreitenden Internationalisierung müssen moderne elektronischen Informationssysteme heute "multilingual" sein, d.h. die verschiedenen weltweit eingesetzten Zeichensätze interpretieren können. Das führte dazu, sich intensiv mit UNICODE auseinanderzusetzen und dies bei der Entwicklung der Retrievalkomponente einzusetzen. UNICODE ist eine Standardisierungsinitiative, die die weltweit vorhandenen Zeichensätze in dem Universal Character Set (UCS) vereinheitlicht hat.

3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: C. Saro, R. Stein, E. Atanassova (bis 31. Mai), D. Jung
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); Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG (Bielefeld)

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. So wurde im Rahmen der bereits traditionell am ZIB stattfindenden Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund von der ZIB-Arbeitsgruppe eine Diskussion zu Möglichkeiten und Problemen des Datenaustausches über das Conceptual Reference Model der CIDOC, insbesondere mit Hilfe von XML, initiiert. Die daraus gegründete bundesweite Arbeitsgruppe wird vom ZIB koordiniert.

Da Vorhaben in Bereich der Museumsdokumentation im allgemeinen auf größere Zeiträume ausgerichtet sind, erwarten die beteiligten Institutionen eine kontinuierliche Zusammenarbeit. So besteht zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz bereits seit 1981 ein mehrfach verlängerter Kooperationsvertrag. Weitere wichtige Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum (seit 1991), dem Bayerischen Nationalmuseum in München (seit 1995), dem Deutschen Hygienemuseum Dresden (seit 1997), dem Museum im Wasserwerk Friedrichshagen (seit 1998) und der Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG Bielefeld (seit 2000). Die Arbeitsgruppe finanziert sich somit weitestgehend aus Drittmitteln.

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

Auch die Verfügbarkeit vorhandener Datenbanken über das Internet wurde im Jahr 2000 wiederum ausgebaut und erweitert.

Die bereits im Sommer 1996 eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen

Historischen Museums² umfaßt dank der kontinuierlichen Verbesserung und Erweiterung inzwischen über 112.000 Datensätze mit etwa 66.000 digitalisierten Objektbildern. Sie bildet damit das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Die Nutzung liegt mit über 2.000 Anfragen pro Woche weiterhin sehr hoch. Auch die Internet-Datenbank des Bildarchivs am Deutschen Historischen Museum³ erfreut sich dieser guten Akzeptanz.

Für das Deutsche Hygiene-Museum in Dresden führte die Internet-Präsenz der Datenbank (seit Ende 1999) bereits mehrfach zu Leihanfragen auch aus dem außereuropäischen Raum⁴. Im Jahr 2000 wurde die Routine für ein vierteljährliches Update etabliert, so daß auch hier die kontinuierliche Erweiterung des Angebots gesichert ist.

Eine spezifische Anwendung wurde für das Institut für Museumskunde entwickelt: Die interne Datenbank einer bundesweiten Arbeitsgruppe "Regelwerke für die Museumsdokumentation" steht jetzt paßwortgeschützt über das Internet zur Verfügung. Auf der Basis unterschiedlicher Rechtezuweisungen können die jeweiligen Nutzergruppen nicht nur in der Datenbank recherchieren, sondern auch neue Datensätze anlegen oder vorhandene Datensätze bearbeiten.

3.2.5 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 (Universität / GH Kassel); 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); Francis Wright und Thomas Wolf (Queen Mary College, London); Beiträge von zahlreichen Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien sowie zahlreichen 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 wurden an der Version REDUCE 3.7 weitere Verbesserungen fertiggestellt und freigegeben sowie die Dokumentation überarbeitet. Wesentliche Neuerungen

²<http://www.dhm.de/datenbank>

³<http://www.dhm.de/datenbank/bildarchiv.html>

⁴<http://www.dhmd.de>

sind die im Leistungsumfang stark erweiterten Versionen des REDUCE Logik Paketes REDLOG, des Differentialgleichungslösers CRACK und ein überarbeitetes MathML interface, das die Version 2 des MathML drafts des W3C implementiert. Ein neues Paket ermöglicht die Umwandlung von Ausdrücken, die in MathML codiert wurden in OpenMath und vice versa.

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.

In Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf wurde für das Queen-Mary and Westfield College in London ein System zur computergestützten Bewertung der mathematischen Vorkenntnisse der Studenten des Colleges erstellt und zur Einsatzreife gebracht. Diese System verbindet Methoden der Computeralgebra (implementiert in REDUCE) mit Techniken des World Wide Webs um den Zugang zu dem System für die Studenten einfach zu gestalten. Wesentlich für dieses System ist auch die Unterstützung des Aufgabenstellers z.B. durch automatisches Generieren von Aufgaben nach Vorgabe eines Schwierigkeitsgrads.

In Zusammenarbeit mit der Fa. R.O.S.E. GmbH wurde an der Integration von REDUCE in das System Rodon 2 gearbeitet. Dabei kommunizieren die Systeme mittels MathML über eine neu erstellte Unterprogrammchnittstelle.

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

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

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. 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 **OpenMath** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Als Weiterführung für das im Jahre 2000 ausgelaufene OpenMath Projekt der EU wurde ein sich inhaltlich anschließendes Thematisches Netzwerk in Brüssel beantragt. Zu den ca. zehn Antragstellern gehört auch das ZIB.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 49.000,- 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 reprint, 2nd edition, 2000.

Computer Science

4.1 Berliner Hochleistungsrechner

Der *Berliner Landeshochleistungsrechner* ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Es besteht aus dem Parallelrechner CRAY T3E und dem Vektorrechner CRAY J90 im ZIB sowie den Berliner Anteilen an den Hochleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechner-Verbunds (NVV). Die Konfigurationsskizze in Abbildung 4.1 gibt einen Überblick der im ZIB betriebenen Rechnerkomponenten.

Die im ZIB betriebenen Rechner sind sehr stark ausgelastet bzw. sogar überlastet. Aufgrund des Alters der beiden Rechner (der Vektorrechner CRAY J90 ist im Jahr 1995, der Parallelrechner CRAY T3E im Jahr 1997 in Betrieb gegangen) und der nunmehr absehbaren Ablösung durch das HLRN-System (s. Abschnitt 4.4) sind im Jahr 2000 nur noch geringe Ausbaumaßnahmen getroffen worden.

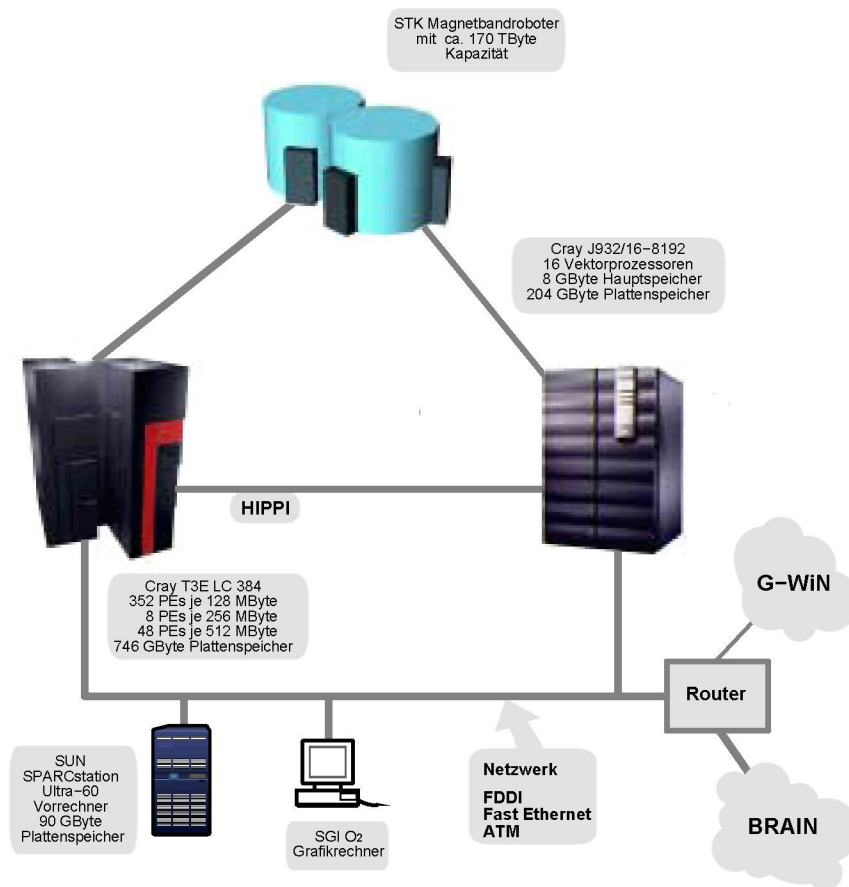
4.1.1 Systemkonfiguration und Software-Ausstattung

Systemkonfiguration

Parallelrechner CRAY T3E

Im Berichtszeitraum haben neben dem kontinuierlich wachsenden Rechenzeitbedarf die I/O-Anforderungen der Benutzer erheblich zugenommen, was auf eine geänderte Jobstruktur zurückzuführen ist. Das vorhandene Dateisystem /work (160 GByte), in dem Benutzerdaten (z.B. für Job-Ketten) in der Regel bis zu vier Wochen aufbewahrt werden, war trotz mehrmaliger Anpassung der entsprechenden Löschroutinen und intensiver Beratung der Benutzer überlaufen, wodurch es zum Abbruch von Benutzerjobs kam. Durch den Ankauf weiterer Plattenlaufwerke (80 GByte) im Oktober 2000 konnte das Problem entschärft werden.

Der Parallelrechner CRAY T3E des ZIB liegt mit seiner theoretischen Spitzenleistung von 408 GFlop/s in den einschlägigen Übersichten über installierte Höchst-



Stand: Dezember 2000

ABBILDUNG 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner im ZIB

leistungsrechner¹ auf dem sechsten Platz in Deutschland, die davor liegenden Plätze werden von Rechnern beim Leibniz-Rechenzentrum München, beim Deutschen Wetterdienst, beim Forschungszentrum Jülich (NIC), bei der Max-Planck-Gesellschaft (RZ Garching) und bei der Universität Stuttgart eingenommen. International liegt die CRAY T3E des ZIB auf Rang 74.

Im Berichtszeitraum traten 43 (im Vorjahr 25) außerplanmäßige Unterbrechungen auf, die Ausfallzeit betrug 150 h (im Vorjahr 113 h), das sind 1,7% (1,3%) der Kalenderzeit. Von diesen 43 Unterbrechungen waren 24 durch fehlerhafte Hardware verursacht, 13 durch fehlerhafte Systemsoftware und sechs durch Fehler in

¹Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer, Erich Strohmaier, *TOP500 Supercomputer Sites*, 16th Edition, <http://www.top500.org/top500.list.html>

der Bedienung bzw. in der Anwendersoftware.

Seit April 2000 ist auf der CRAY T3E das *Autoboot and Monitoring Feature*, eine gemeinsame Entwicklung des Forschungszentrums Jülich und der Fa. SGI/CRAY, im Einsatz. Diese Software, die auf einem eng gekoppelten Überwachungsrechner läuft, prüft regelmäßig die Verfügbarkeit der CRAY T3E, stößt bei Bedarf einen Boot-Prozeß an und informiert per Mail und ggf. SMS die zuständigen Operateure. In den letzten neun Monaten hat sich die Software bestens bewährt: Während der Zeiten des unbedienten Betriebs traten dreizehn Ausfälle auf, die durch die Boot-Automatik behoben werden konnten. Die gesamte Ausfallzeit während des unbedienten Betriebs lag bei zwölf Stunden, ohne Automatik hätte der Rechner in der Regel bis zum Eintreffen der Techniker nicht genutzt werden können (ca. 77 h).

	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 MByte 352 PEs mit je 128 MByte 8 PEs mit je 256 MByte	8 GByte Shared Memory
Topologie	3-dimensionaler Torus	Y-MP
Transferrate	480 MByte/s	51,2 GByte/s
Bisectionsbandbreite	122 GByte/s	
Ein-/Ausgabe-System	3 GigaRinge	6 I/O Cluster 8 MByte Pufferspeicher
Transferrate	≥ 1 GByte/s	50 MByte/s je I/O Cluster
Plattenspeicher	746 GByte	204 GByte
Transferrate	10–17 MByte/s	7,2–12,4 MByte/s
Ges. Transferrate	940 MByte/s	243 MByte/s
Anschlüsse für Bandlaufwerke	4 SCSI mit je 20 MByte/s	4 Tape Channel Adapter mit je 20 MByte/s
Netzanschlüsse	2 x HIPPI mit 100 MByte/s ATM mit 19,4 MByte/s FDDI mit 12,5 MByte/s	HIPPI mit 100 MByte/s FDDI mit 12,5 MByte/s
Spitzenleistung	402 GFlop/s	3,2 GFlop/s

Tabelle 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner

Vektorrechner CRAY J90

Die Konfiguration des Vektorrechners (16 Prozessoren, Spitzenleistung 3,2 GFlop/s, 8 GByte gemeinsamer Hauptspeicher) blieb im Berichtszeitraum un-

verändert. Das Nutzungsspektrum dieses Rechners verschob sich - auch wegen seiner schwachen Prozessorleistung - hin zu speicherintensiven Anwendungen, die auf nur wenigen Prozessoren laufen. Im vergangenen Jahr lag die Prozessorauslastung nur noch bei 52%, die mittlere Speicherauslastung betrug jedoch 68%, wobei an einzelnen Tagen Durchschnittswerte von 92% erreicht wurden.

Datenhaltungssystem STK 9310

Am Beginn des Jahres 2001 konnte eine Modernisierung des Datenhaltungssystems durchgeführt werden: Die Robotertechnik des Gerätes wurde bei Beibehaltung beider Silos auf das verbesserte System STK 9310 (PowderHorn) umgerüstet, gleichzeitig wurden vier der Magnetbandgeräte (RedWood, SD-3-Technik) durch sieben neu entwickelte Magnetbandgeräte vom Typ STK 9840 ersetzt. Bei dieser Technik werden 288 Spuren auf Band aufgezeichnet. Die Kapazität einer Kassette liegt zwar mit 20 GByte unterhalb 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 der entsprechende Wert der RedWood-Technik (53s). Für Backup- und Archivierungsdienste standen im Dezember 2000 ca. 4000 Magnetbänder mit insgesamt ca. 170 TByte Kapazität zur Verfügung.

Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner liefern die Tabellen 4.2 und 4.3. Als neue Produkte wurden die Pakete HDF5 und netCDF beschafft.

	Parallelrechner CRAY T3E LC 384	Vektorrechner CRAY J932/16-8192
Betriebssystem	UNICOS/mk	UNICOS
Systemsoftware	DMF, NQE	DMF, NQE
Compiler	ANSI C, C++, CF90, HPF	ANSI C, C++, CF90
Tools	CRAYTools, MPT, MPICH HDF5, netCDF	CRAYTools, MPT, MPICH AIT, netCDF
Numerik	CRAYLibs, C++ Math C++ Tools Aztec, NAG F. Lib.	CRAYLibs, Aztec, IMSL NAG C Lib., NAG F. Lib. NAG F.90 Lib.
Visualisierung	CVT	CVT, EnSight, GrADS NAG Graph. Lib. NCAR Graphics, NewGKS
Ingenieurwissenschaften	FLUENT	ABAQUS, ADINA, FLUENT

Tabelle 4.2: Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner

Parallelrechner CRAY T3E LC 384	Vektorrechner CRAY J932/16-8192		
Ab-initio- Programme	Ab-initio- Programme	Semiempirische Programme	Kraftfeld- Programme
AMBER, DGauss GAMESS (UK) NWChem TURBOMOLE	ACES II, CADPAC CRYSTAL 92 DGauss GAMESS (UK) GAMESS (US) Gaussian 98 MOLPRO 96	AMPAC MNDO 94 MOPAC	GROMOS 96

Tabelle 4.3: Chemie-Pakete auf den Hochleistungsrechnern

4.1.2 Zulassungsausschuß und Großprojekte

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 (Zusammensetzung siehe Kapitel 1), das seine Aufgabe in der Unterstützung besonders wichtiger Forschungsvorhaben mit einem erheblichen Ressourcenbedarf 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 Ressourcenbedarfs und der im Norddeutschen Vektorrechner-Verbund (NVV) verfügbaren Kapazität teilt der Ausschuß Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Die Nutzung des Parallelrechners hat sich im Jahre 2000 noch stärker auf die Großprojekte konzentriert: Es wurden im ZIB insgesamt 58 Berliner Großprojekte aus den Gebieten Chemie, Ingenieurwissenschaften, Klimaforschung und Physik auf den Rechnern des NVV versorgt; im Mittel konnten von diesen einzelnen Projekten auf der CRAY T3E 1.828 „ZIB Parallelrechner Leistungseinheiten“ (ZPL)² aufgenommen werden, dies sind 28% mehr als im Vorjahr. Die Anzahl der Projekte ist gegenüber dem Vorjahr um 20 gesunken. Mit dieser Tendenz wird den Vorgaben des Wissenschaftsrates und der Deutschen Forschungsgemeinschaft, ausschließlich sehr große Projekte auf den Hochleistungsrechnern zur Ausführung zu bringen, Rechnung getragen (s. auch URL: <http://www.zib.de/rz/zulassung>).

Der Parallelrechner CRAY T3E war während der gesamten Berichtsperiode vollständig ausgelastet (vgl. Abbildung 4.2). Regelmäßig lagen dem Zulassungsausschuß erheblich mehr Wünsche auf Rechenzeitkontingente vor als vorhanden waren. Pro Quartal kann der Rechner 25.750 ZPL für zulassungspflichtige Projekte abgeben, allein für das 4. Quartal 2000 lagen Anträge auf 45.600 ZPL und damit

²Eine ZPL entspricht 16 Prozessorstunden auf der CRAY T3E

Wünsche über fast die doppelte Leistung des Rechners vor.

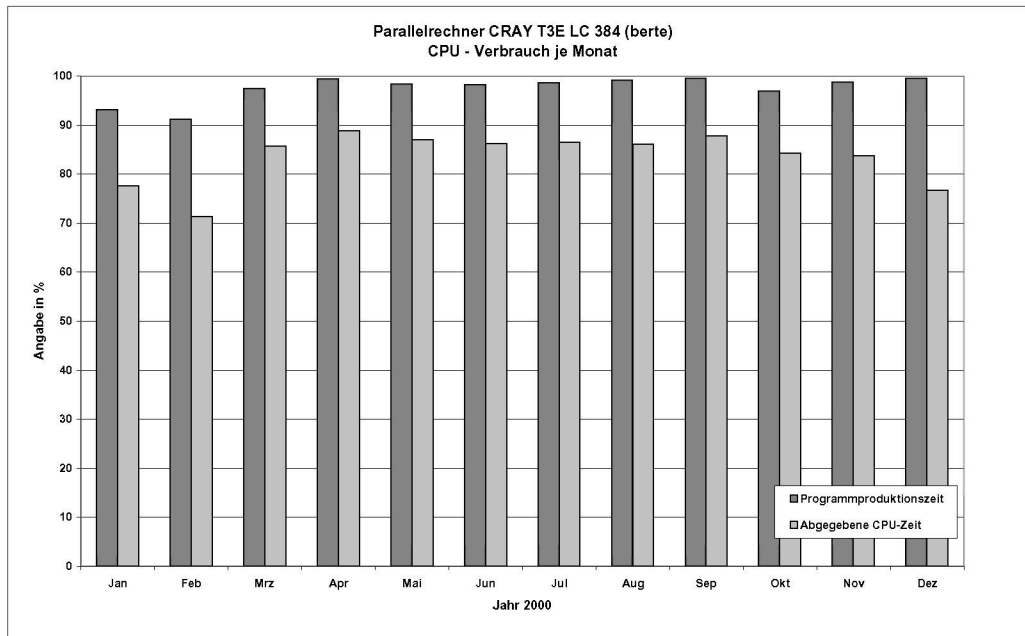


ABBILDUNG 4.2: Auslastung der CRAY T3E durch Projekte des Zulassungsausschusses

Großprojekte

Das Spektrum der Nutzerschaft hat sich gegenüber dem Vorjahr nicht verändert. Der Zulassungsausschuß hat im Berichtszeitraum neben 46 Projekten aus den Berliner Universitäten auch sechs Projekten aus Universitäten in den Neuen Bundesländern sowie fünf Projekten aus sonstigen wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Rechenzeit in nennenswertem Umfang bewilligt. Ferner wurde im Vorgriff auf den HLRN-Verbund einem Projekt der Universität Kiel aus dem Kontingent des Zulassungsausschusses außerhalb des Kontingents des Landes Schleswig-Holstein Rechenzeit bewilligt.

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugewiesenen Rechenzeitkontingenten. Im Berichtszeitraum haben die drei Fachgebiete mit dem größten Rechenzeitverbrauch nahezu gleich große Anteile aufgenommen (in Klammern jeweils die Werte aus dem Vorjahr): Ingenieurwissenschaften 33% (42%), Physik 28% (37%) und Chemie 27% (19%). Lediglich das Fachgebiet Geowissenschaften nahm nur 12% (2%) in Anspruch. Die neuen Projekte aus dem Fachgebiet Biologie nahmen weiterhin nur wenig Rechenzeit auf.

Die elf größten Projekte im Jahr 2000 auf der CRAY T3E haben jeweils für einen Zeitraum von bis zu zwölf Monaten 78.500 ZPL bewilligt bekommen, das ist 52% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Zulassungsausschuß bewilligten Rechenkapazität:

- Geowissenschaften: *Hochauflösende Modellierung der thermohalinen Zirkulation*, CAU Kiel, 12.000 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Kleinskalige Instabilitäten als Bausteine der turbulenten Energiekaskade*, FU Berlin, 10.500 ZPL.
- Physik: *Raum-zeitliche Strukturbildung in den zirkumstellaren Hüllen kühler Sterne*, TU Berlin, 10.000 ZPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik katalytisch relevanter Systeme*, HU Berlin, 10.000 ZPL.
- Chemie: *Periodische sowie Cluster- und Embedded Cluster-Rechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität unterschiedlicher Vanadiumoxidaggregate mit Ab-initio-Methoden*, HU Berlin, 8.000 ZPL.
- Physik: *Neutron Production in Laser Irradiated Foils at Ultra-high Intensities*, Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie Berlin, 6.000 ZPL.
- Physik: *Anorganische Moleküle und Cluster in Astrophysikalischen Staubbildungsprozessen*, TU Berlin, 6.000 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Numerische Simulation von Hochauftriebsströmungen*, TU Berlin, 5.000 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Large Eddy Simulation für komplexe Geometrien*, TU Berlin, 5.000 ZPL.
- Physik: *Optoelektronische Eigenschaften von Halbleiterquantenpunkten*, TU Berlin, 4.000 ZPL.
- Physik: *Atomar einlagige Nanostrukturen aus Indium-Arsenid auf Gallium-Arsenid (001)*, TU Berlin, 4.000 ZPL.

4.1.3 Sicherheit

Im Berichtszeitraum war weltweit eine wachsende Zahl an Zugangsverletzungen von Rechnern und Netzen zu verzeichnen, die mit steigendem technischen Kenntnisstand und erhöhtem Einsatz von Ressourcen ausgeführt wurden. Herausragend war der Mißbrauch fremder Rechner – ohne Wissen der Betreiber – zu zeitlich abgestimmten Massenangriffen gegen ausgewählte Ziele.

Vor diesem Hintergrund bleibt die Förderung des Sicherheitsbewußtseins bei den internen und externen Benutzern der Rechner des Konrad-Zuse-Zentrums,

aber auch bei den Systemadministratoren, eine vorrangige Aufgabe. Oft, wie bei der Anwendung der *Secure Shell*, ist erhöhte Sicherheit mit einem Verlust an Bedienkomfort verbunden, der – falls möglich – durch die Bereitstellung von Ersatzlösungen teilweise ausgeglichen werden kann. Ein Beispiel sind die vom ZIB entwickelten und bereitgestellten Programme *dmscp/yscp*, die bei der Übertragung großer Dateien eine sichere Alternative zum Unix-Standardprogramm *rcp* bieten.

Die Verbreitung der Nutzung der *Secure Shell*, die inzwischen auf fast allen Rechnern des ZIB installiert ist, wurde weiter vorangetrieben. Es erfolgte ein Übergang auf die SSH-Version 2, die eine komfortablere und konsistentere Benutzung ermöglicht. Das ZIB nutzt dabei kostenlose Lizenzen des DFN-Vereins, die dieser an seine Mitgliedseinrichtungen im Rahmen einer Vereinbarung mit dem kommerziellen Anbieter der Software vergibt.

An laufenden Aufgaben, die im Berichtszeitraum weitergeführt wurden, sind die Sicherheitsüberprüfung von Paßwörtern, die Prüfung auf Schwachstellen bei der Netzanbindung der ZIB-Rechner und die Ausstellung von PGP-Zertifikaten durch die Zertifizierungsstelle des ZIB zu nennen.

4.2 Fachberatung

Das im Jahresbericht 1996 näher beschriebene Konzept der Fachberatung für die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte durch „*HPSC-Lotsen*“ hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird zunehmend von anderen HPC-Zentren übernommen. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des ZIB zugeordnet (siehe Tabelle 4.4).

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Dipl.-Math. Hans-Hermann Frese Dipl.-Math. Wilhelm Vortisch
Chemie	Dr. Detlef Reichardt – bis 31.12.00 Dr. Thomas Steinke
Informatik	Dr. Jens Simon Dipl.-Inform. Florian Schintke
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 4.4: 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 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 Anwendungs-Software.

Neben der Unterstützung von Anwendern in allen Fragen der Bearbeitung ihrer Projekte beteiligen sich die Fachberater an der Forschung in einschlägigen Arbeitsgruppen und geben ihr Wissen und Know-How im Rahmen von Lehr- und Ausbildungsveranstaltungen weiter. Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung der Projekte.

4.2.1 Chemie und Bioinformatik

Der anteilige Rechenzeitverbrauch der Chemieprojekte auf dem Parallelrechner CRAY T3E ist im Berichtsjahr weiter auf 27% gestiegen (Vorjahr 19%).

Auf der CRAY T3E wurden neue Programme für ausgewählte Nutzergruppen portiert bzw. installiert. So ist z.B. an der Portierung der ersten Parallelversion von *CD-HMC* (Conformation Dynamics via Hybrid Monte Carlo) gearbeitet worden und die neue *TURBOMOLE*-Version 5.3 konnte zum Jahresende in einer ersten Testversion bereitgestellt werden. Für die Arbeitsgruppe von Prof. Sauer (HU) wurde die aktuelle Version von *COLUMBUS* auf der CRAY T3E zum Laufen gebracht.

Für Bioinformatik-Anwender im Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik wurde eine MPI-basierte distributed memory-Version von *BLAST* auf CRAY T3E und Linux-Cluster implementiert.

Kooperationen

Im Rahmen des QUASI-Projektes³ wurden von NORSK HYDRO auf der CRAY T3E komplexe molekulare Simulationen von Elementarprozessen in Zeolithen mit dem Programmsystem *QUASI-HPC* (ChemShell) durchgeführt.

³<http://www.cse.clrc.ac.uk/Activity/QUASI>

Elektronenstruktur von {AlO}-Clustern

Bearbeitet von: Thomas Steinke

Kooperationspartner: Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, D. Sülzle (Technische Universität Berlin)

Zur Beschreibung der Staubbildungsprozesse auf molekularem Niveau ist die genaue Kenntnis energetischer und struktureller Daten kleiner anorganischer Cluster unabdingbar. Zur Aufklärung der Nukleationsprozesse und damit der Bildung erster Keime in speziell sauerstoffreichen astrophysikalischen Situationen wurden die theoretischen Untersuchungen an Al_xO_y -Clustern fortgeführt. Speziell wurden strukturelle Eigenschaften der energetisch stabilsten Al_4O_4 -Isomere mit Hilfe verschiedener nichtempirischer quantenchemischer Methoden wie HF-SCF, MP2, DFT und CCSD(T) berechnet [1]. Rechnungen zum $Al_{60}O_{60}$ -System sind gegenwärtig in Arbeit.

Publikationen

- [1] Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *Electronic structure investigation of the Al_4O_4 molecule*, Chem. Phys. Lett. **324** (2000), 108-114.

4.2.2 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 ist gleich geblieben, die von diesen Projekten verbrauchte Rechenzeit hat auf dem Parallelrechner wieder zugenommen. Berücksichtigt man auch diejenigen Projekte, die über die NVV-Partnerkontingente am ZIB rechnen, so hat sich der Anteil der insgesamt abgenommenen Rechenzeit des Fachgebietes auf dem Parallelrechner mit über 24% gegenüber dem Vorjahr (15%) deutlich erhöht.

Dieser Zuwachs wurde auch durch typische Anwendungen aus dem Bereich der norddeutschen Küstenländer bewirkt. Für das Jahr 2001 sind weitere Projekte dieser Art aus dem HLRN-Verbund zu erwarten.

Dies reflektiert auch das für die norddeutschen Küstenländer typische Anwendungsprofil, dessen Verstärkung wir auch für das Jahr 2001 durch weitere Projekte aus dem HLRN-Verbund erwarten, die Kontingente über den Zulassungsausschuß beantragen.

Zu den größten Rechenzeitabnehmern 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 zukünftigen HLRN-System einsetzen wird.

4.2.3 Ingenieurwissenschaften

Die Anzahl der aktiven Großprojekte ist im Berichtszeitraum leicht auf 16 zurückgegangen. Der Anteil der abgenommenen Rechenzeit liegt für das Fachgebiet auf dem Parallelrechner mit 33% weiter auf hohem Niveau, während die Nutzung des Vektorrechners wie bisher gering geblieben ist.

Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) setzen ihre selbstgeschriebenen Forschungscode mittlerweile fast ausschließlich auf dem Parallelrechner ein.

Die Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich arbeiten mit dem kommerziellen Paket *ABAQUS* auf dem Vektorrechner. Die Nutzung von *ABAQUS* hat insgesamt im Berichtszeitraum weiter zugenommen.

Kooperationen

Bearbeitet von: Wolfgang Baumann

Kooperationspartner: INPRO (Innovationsgesellschaft für fortgeschrittene Produktionssysteme in der Fahrzeugindustrie mbH, Berlin)

In Zusammenarbeit mit der Berliner Firma INPRO wird der Lösungsalgorithmus des INPRO FEM-Codes zur Simulation von Umformprozessen zum Einsatz auf Parallelrechnern mit verteiltem Speicher umgeschrieben und der Code auf die CRAY T3E-Architektur portiert.

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 unser Interesse der Unterstützung der Projekte durch Nutzbarmachung neuerer Methoden und Konzepte wie z.B. die interaktive, netzverteilte Simulation (Simulation Steering) und Visualisierung. Im Ausbildungsbereich engagieren wir uns in der Durchführung von Kursen (MPI-Kurs) und in Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel-Computing*).

4.2.4 Physik

Die Zahl der bearbeiteten Großprojekte aus dem Bereich Physik liegt mit 18 im Rahmen der vorangegangenen Jahre. Diese Großprojekte haben etwa 25% der auf der CRAY T3E abgegebenen Rechenzeit verbraucht. Von dieser Rechenzeit wurden an Projekte aus Berlin 68%, aus Niedersachsen 15%, aus Schleswig-Holstein 11% und andere 6% abgegeben.

Auf der CRAY T3E haben die Physiker deutlich weniger gerechnet als im Vorjahr. Ein entscheidender Grund dafür ist darin zu sehen, daß die Gitterfeldtheoretiker zunehmend den neuen Höchstleistungsrechner Hitachi SR8000 am Leibniz-Rechenzentrum in München in Anspruch nehmen.

Gitterfeldtheorie

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: Volkard Linke (Freie Universität Berlin); Ernst-Michael Ilgenfritz (Osaka 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.

In diesem Jahr wurden die Untersuchungen zur Verbesserung von Simulationen der Quantenchromodynamik (QCD) durch paralleles Tempering zu einem vorläufigen Abschluß gebracht [1].

Hauptaktivität war die Erweiterung des bestehenden QCD-Programms um die nicht-störungstheoretische $O(a)$ Verbesserung. Das Programm wird von der am DESY Zeuthen geleiteten QCDSF Collaboration in Produktion auf der Hitachi SR8000 des Leibniz-Rechenzentrums in München eingesetzt [2].

Publikationen

- [1] E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler, M. Müller-Preussker and H. Stüben, *Parallel tempering and decorrelation of topological charge in full QCD*, Report 00-25, ZIB, 2000.
- [2] H. Stüben, QCDSF and UKQCD Collaborations, *Hadron masses from dynamical, non-perturbatively $O(a)$ improved Wilson fermions*, Report 00-52, ZIB, 2000.

4.3 Projekte im Bereich Weitverkehrsnetze

4.3.1 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 wissenschaftliche und kulturelle Einrichtungen in Berlin und Potsdam (Abbildung 4.3) und stellt für die meisten von ihnen auch den Anschluß an das deutsche Wissenschaftsnetz G-WiN (bislang: B-WiN, künftig G-WiN) und an das Internet her. Von einer zunehmenden Zahl von Einrichtungen wird BRAIN außerdem zur internen Vernetzung ihrer in der Stadt bzw. in der Region verteilten Standorte genutzt.

Zentrales Planungs- und Steuerungsorgan für BRAIN ist die von der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur eingerichtete BRAIN-Planungsgruppe. Sie besteht aus Mitarbeitern der drei Universitäten und des ZIB. Die BRAIN-Geschäftsstelle ist im ZIB angesiedelt.

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 der BRAIN-Planungsgruppe - für die Wissenschaftseinrichtungen aufgebaut worden ist. Innerhalb des Landesnetzes werden Fasern mit einer Gesamtlänge von ca. 2.000 km BRAIN und damit den Wissenschaftseinrichtungen der Stadt zur Verfügung gestellt.

Das von BRAIN genutzte Glasfasernetz konnte im Jahre 2000 wiederum erweitert werden. Neue Anschlüsse erhielten die Fachhochschule für Technik und Wirtschaft (FHTW) an ihrem Standort in Lichtenberg (Allee der Kosmonauten) sowie der Technologie- und Innovationspark der TU Berlin (TIB) in Wedding (Gustav-Meyer-Allee). Die Anschlüsse der Wissenschaftseinrichtungen GMD-Forschungsinstitut für offene Kommunikationssysteme (GMD-Fokus), Fraunhofer-Institut für Software- und Systemtechnik (ISST), Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) sowie die Kernringstrecke zwischen den Behördenstandorten Rotes Rathaus und Altes Stadthaus konnten mit zusätzlichen Fasern aufgerüstet werden.

Das wichtigste Neubauvorhaben des Jahres 2000 war die sogenannte "Südschiene" zwischen Zehlendorf und Adlershof, die allerdings wegen Problemen auf einem Teilstück nun doch erst im April 2001 in Betrieb gehen wird. Durch die neue Kabelstrecke (mit einer Länge von ca. 30 km) wird eine weitere Ringverbindung - neben dem Kernring mit seiner Ost- und Westschleife - innerhalb des BRAIN entstehen, wodurch eine größere Ausfallsicherheit erreicht werden kann. Dies war seit langem vor allem von den wissenschaftlichen Einrichtungen auf dem WISTA-

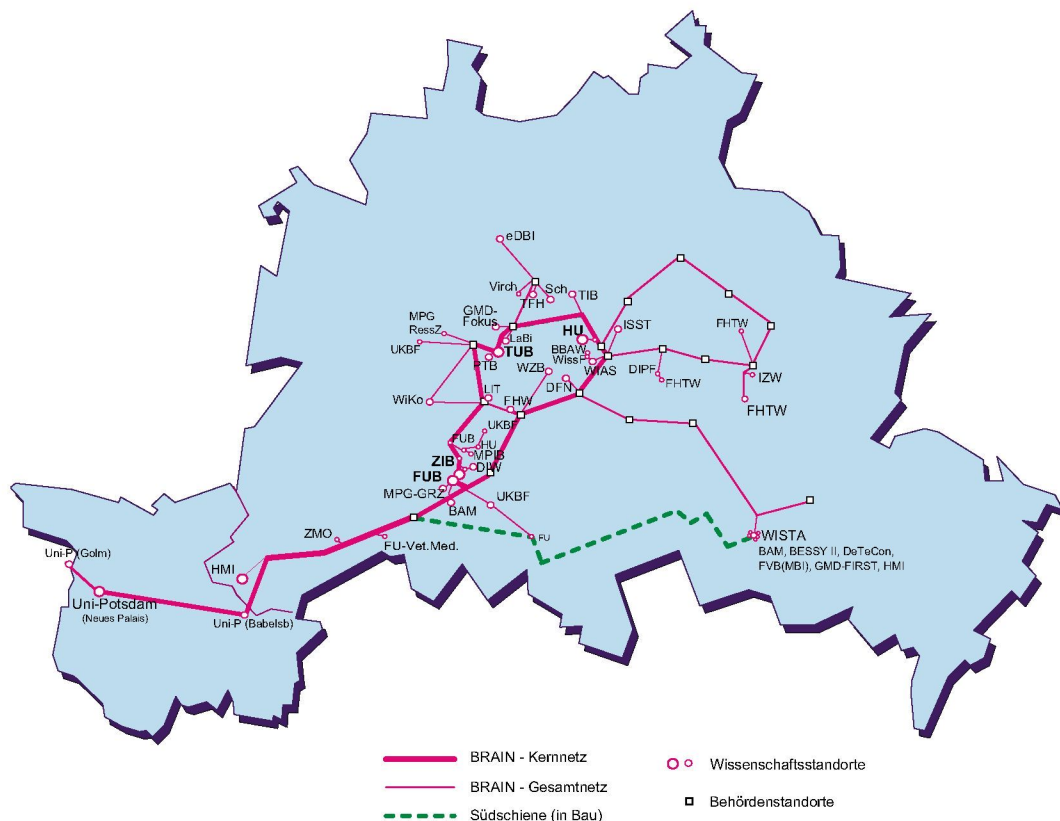


ABBILDUNG 4.3: BRAIN⁺: Das Wissenschaftsnetz der Region Berlin/Potsdam

Gelände in Adlershof gefordert worden, die befürchten müssen, dass künftige Großbauvorhaben im Südosten Berlins zu Beeinträchtigungen für ihre derzeit einzige Zubringerleitung führen könnten.

Die Kosten für die Herstellung der Südschiene werden vom LIT und einigen Wissenschaftseinrichtungen in Adlershof (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berliner Elektronenstrahl Synchrotron (Bessy), Forschungsverbund Berlin (FVB), GMD-Forschungsinstitut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik (GMD-FIRST), Hahn-Meitner-Institut (HMI) und Humboldt-Universität zu Berlin (HU)) getragen. Das LIT war an der neuen Verbindung selbst interessiert, um diverse Subnetze in den südlichen Bezirken von Berlin untereinander und mit dem MAN verbinden zu können.

Das noch aus den früheren BRTB-Projekten (Berlin Regional Testbed) stammende sog. "Classical BRAIN" wurde als autonomes Netz weiter ausgebaut. Es dient den wissenschaftlichen Einrichtungen der Region vor allem zur Vernetzung ihrer verteilten Standorte. Neben der schon bisher betriebenen ATM-Technik wird in einem Teilbereich des Netzes nun auch Gigabit-Ethernet-Technik eingesetzt. Schnittstellen zwischen den beiden Netzen werden im Jahr 2001 voraussichtlich

in der Humboldt-Universität und im ZIB eingerichtet werden. Das ATM-Netz zwischen den Einrichtungen BAM, FVB, HU und Universität Potsdam wurde im November 2000 in Betrieb genommen, das GbE-Netz zwischen Instituten der Fraunhofer-Gesellschaft (FhG) und der Technischen Universität im Dezember 2000.

4.3.2 Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) des DFN

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

Der Wechsel zum G-WiN als neuem Höchstleistungsnetz des DFN bringt nicht nur zahlreiche technische Neuerungen mit sich, sondern er bedeutet zugleich auch eine völlig neue Konzeption für die vertraglichen Grundlagen. Beim früheren B-WiN beruhte die Nutzung - jedenfalls in Berlin und in Potsdam - auf dem Modell eines Gemeinschaftsanschlusses, bei dem die insgesamt bezogene Bandbreite unter die beteiligten Einrichtungen aufgeteilt wird und bei dem die Datenleitungen zum Hauptanschluß von den Nutzern selbst bereit gestellt und finanziert werden müssen. Es liegt auf der Hand, dass bei einer solchen Struktur regionale Verbände am kostengünstigsten in den verdichteten Ballungsräumen zu organisieren sind. Das neue G-WiN-Konzept des DFN folgt dagegen dem Prinzip der "Tarifeinheit in der Fläche", d.h. jeder Nutzeranschluß wird individuell und vollständig vor Ort versorgt. Dies geschieht überall zu den gleichen Bedingungen, unabhängig davon, wo der Nutzer sich befindet. Die neue Tarifstruktur ist für Ballungsräume ungünstig; dennoch gelang es, die in der Region Berlin/Potsdam vorhandene gute Leitungsinfrastruktur in das G-WiN mit einzubringen.

Die Vorbereitungen zur Migration nach G-WiN haben das Jahr 2000 geprägt. In Bezug auf das überregionale Netzwerk, d.h. zur Einrichtung der 30 über das gesamte Bundesgebiet verteilten Kernnetzknotten, konnten die Arbeiten Mitte des Jahres abgeschlossen werden. Am 30. Juni wurde in einer Festveranstaltung des DFN in den Räumen des ZIB und in Anwesenheit der Bundesministerin für Bildung und Forschung, Frau Bulmahn, das G-WiN offiziell in Betrieb genommen (Abbildung 4.4).

Der Kernnetzknotten zur Versorgung der Regionen Berlin, Brandenburg (außer Cottbus), Mecklenburg-Vorpommern und Sachsen-Anhalt wurde im ZIB eingerichtet, wo der DFN einen Raum zur Aufstellung der Technik angemietet hat (Abbildung 4.5). Ein wesentlicher Gesichtspunkt für die Standortwahl war, daß im ZIB nicht nur die Datenleitungen aus mehreren Richtungen separat zugeführt werden können, sondern daß auch die Stromversorgung über zwei voneinander unabhängige Systeme erfolgen kann und der Raum zu jeder Tages- und Nachtzeit für Beauftragte des DFN-Vereins zugänglich ist.



ABBILDUNG 4.4: Eröffnung des G-WiN durch die Bundesministerin Frau Bulmahn zusammen mit den Herren Brauner (Deutsche Telekom) und Professor Jessen (DFN-Verein) im Hörsaal des ZIB.

Die Umstellungsvorbereitungen für die Endteilnehmer in der Region Berlin/Potsdam sind leider nicht so zügig voran gekommen, wie es geplant war. Lediglich das ZIB selbst ist seit dem 24. August über das G-WiN erreichbar. Für die anderen Teilnehmer, die über BRAIN-Fasern angeschlossen werden sollen, hat sich wegen Lieferschwierigkeiten bei den Geräten für die neue SDH-Technik der Anschluß immer wieder verzögert.

Durch die Migration zum G-WiN ergeben sich auch für die regionale Struktur des BRAIN weitreichende technische und organisatorische Veränderungen. Die bisherige Topologie eines Kernringes, von dem aus dezentral Wissenschaftseinrichtungen angeschlossen sind, wird beim G-WiN aufgegeben zu Gunsten einer reinen Sternstruktur. Jeder G-WiN-Teilnehmer in Berlin wird mittels SDH-Technik an den Kernknoten im ZIB herangeführt. Die dafür erforderlichen Faserstrecken hat der DFN von BRAIN - und für den Potsdamer Bereich von der Universität Potsdam - angemietet.

Neben dem Vertrag zur Nutzung von BRAIN-Fasern wurde mit dem DFN eine weitere Vereinbarung getroffen. Sie sieht vor, durch ein zusätzliches regionales



ABBILDUNG 4.5: Die Schaltschränke des DFN enthalten (von links nach rechts): 1. Kernnetzrouter CISCO 12016; 2. Regionale Accessrouter CISCO 12008; 3. Routertechnik für die lokale IP-Vermittlung sowie Geräte für ein von IP unabhängiges Störungsmanagement; 4. Patchfelder mit unterschiedlichen Kupplungen für verschieden Anschlußtypen.

IP-Management und unter Einbeziehung der im BRAIN angelegten Ringstrukturen die Ausfallsicherheit für alle angeschlossenen Teilnehmer in der Region Berlin/Potsdam zu erhöhen. Außerdem wurde vereinbart, für BRAIN-Teilnehmer den regionalen Datenverkehr untereinander bei der Berechnung des G-WiN-Datenvolumens außer Ansatz zu lassen. Die Kosten für diese zusätzlichen Dienstleistungen des DFN werden aus dem Entgelt für die Nutzung der BRAIN-Fasern aufgebracht. Vertragspartner in allen Verträgen mit dem DFN ist das ZIB, das insofern treuhänderisch für BRAIN und in Vertretung der Senatswissenschaftsverwaltung aufgetreten ist.

4.3.3 Koordinierung der Berliner Gigabit-Testbed-Projekte

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

Förderung: DFN-Verein; Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF); Deutsche Telekom

Seit 1997 führt der DFN-Verein - mit Fördergeldern des BMBF und der Deutschen Telekom - Projekte durch, in denen künftige Anwendungen im Gigabit-Bereich erprobt werden. Aus der Region Berlin/Potsdam beteiligen sich mehrere Wissenschaftseinrichtungen (u.a. auch das ZIB) an einzelnen Teilprojekten. Für die Dauer von zwei Jahren (d.h. bis Ende Oktober 2000) war auch eine Koordinierungsstelle für die in der Region angesiedelten Teilprojekte geschaffen und im ZIB eingerichtet worden.

Zur Durchführung der Projekte ist eine zwischen München und Erlangen bestehende Gigabit-Teststrecke nach Berlin verlängert worden mit Endpunkt in der Technischen Universität Berlin. Von dort aus wurden – innerhalb des Netzes von BRAIN, jedoch auf separaten Fasern – die Projektteilnehmer angeschlossen.

Da die einzelnen GTB-Teilprojekte zu unterschiedlichen Terminen ihre Arbeit aufgenommen haben, für alle aber eine individuelle Laufzeit von 24 Monaten vorgesehen ist, müssen in der Region Berlin/Potsdam einige der Datenleitungen noch bis Oktober 2001 aufrecht erhalten werden. Die Projekte, an denen das ZIB beteiligt war, sind zum Ende des Jahres 2000 abgeschlossen worden.

4.3.4 Metacomputing in der Quantenchemie

Bearbeitet von: Detlef Reichardt, Thomas Steinke

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

Förderung: DFN-Verein

Gegenstand dieses Teilprojektes war die prototypische Implementierung von Lösungen zur Durchführung WAN-verteilter quantenchemischer Rechnungen mit *GAMESS-UK* auf den CRAY T3E in Berlin (ZIB) und Garching (MPG/RZG) (ca. 700 km Entfernung). Für die Kommunikation über WAN wurde als transparente MPI-Schnittstelle PACX eingesetzt.

Ziel war es, verteilte quantenchemische Berechnungen zu ermöglichen und durch Nutzung der Kapazitäten mehrerer Supercomputer die Komplexität der behandelbaren Modelle zu vergrößern bzw. die turn-around-Zeiten zu verkürzen.

Die Originalversion von *GAMESS-UK* verwendet hinsichtlich der Parallelisierung

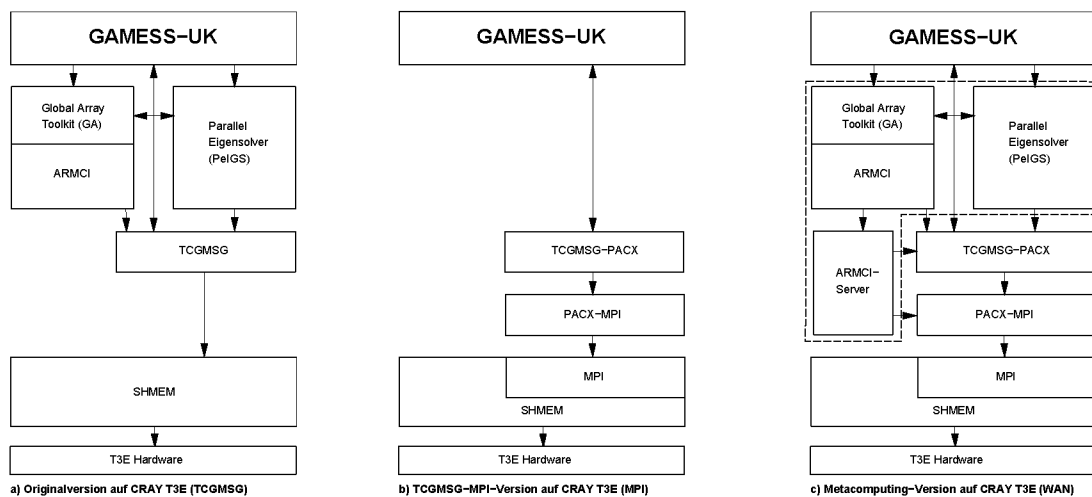


ABBILDUNG 4.6: Schichtenmodell der in GAMESS-UK eingesetzten Kommunikations- und davon abhängigen Numerikbibliotheken

die portable Message-Passing Bibliothek TCGMSG auf welcher der Global Array Toolkit (GA) aufsetzt, und darauf wiederum der parallele Eigenwertlöser PeIGS (vgl. Abbildung 4.6 Teil a).

Als Basis der Implementierungsarbeiten diente eine bereits vorhandene MPI-Schnittstelle (TCGMSG-MPI). Die damit erstellte MPI-Version von GAMESS-UK (vgl. Abbildung 4.6 Teil b) zeigt für mittlere Molekülgrößen (ca. 400 Basisfunktionen) bei DFT-Rechnungen ein gutes Skalierungsverhalten.

Für die Metacomputing-Version mit PACX, zunächst ohne GA und PeIGS (in Abbildung 4.6 Teil c gestrichelt), wurde ein verteilter globaler Taskzähler implementiert, um dynamische Lastbalancierung über WAN zu ermöglichen.

DFT-Rechnungen von Morphin (410 Basisfunktionen – vgl. Abbildung 4.7) für 32 bis 128 PEs auf T3E (300 MHz, Garching) zeigen im Vergleich zu verteilten Rechnungen zwischen Garching und Berlin (16+16 bis 64+64 computing PEs) einen Leistungsabfall der PACX-Version bezüglich der lokal laufenden MPI-Version von 8%. Hierbei werden typischerweise 300 MB an Daten in Broadcast- und globalen Operationen über das WAN transportiert. Der relativ geringe Leistungsabfall ist durch die verteilte dynamische Lastbalancierung und den sparsamen Einsatz globaler Barrieren induziert.

Ab Version 3 (Anfang 2000) setzte GA auf ARMCi (Aggregate Remote Memory Copy Interface) als Laufzeitsystem für die einseitige Kommunikation auf. Für die Anpassung der GA an eine Metacomputing-Umgebung mit PACX (Abbildung 4.6 c, gestrichelter Bereich) wurde die TCGMSG-PACX-Schnittstelle um lokale Kommunikatoren erweitert. Es wurde ein prototypischer ARMCi-Server

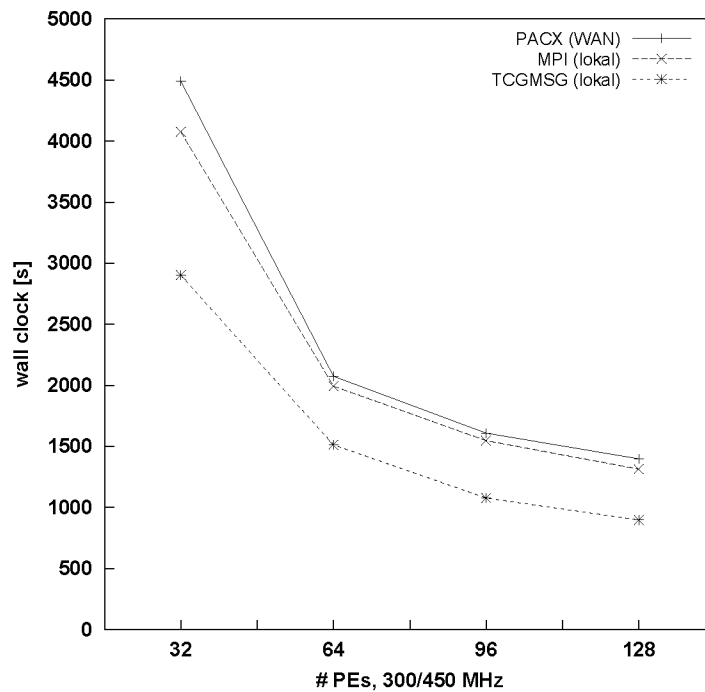


ABBILDUNG 4.7: Skalierungsverhalten verschiedener GAMESS-UK-Versionen: Gesamtrechenzeit einer Energie- und Kraftberechnung für Morpholin (BLYP, 6-31G(d,p))

implementiert, um einseitige Kommunikationsanforderungen über das WAN abzuarbeiten (eine vollständige Integration des ARMCI-Server in das GAMESS-UK steht noch aus). Damit sollte z.B. die redundante Diagonalisierung auf den lokalen Partitionen bei angestrebten Problemgrößen von 1000-2000 Basisfunktionen möglich sein.

4.3.5 Gigabit-Testbed Projekt „GÜTE“

Bearbeitet von: Wolfgang Pyszkalski, Dirk Krickel, Marion Schünemann

Kooperationspartner: EANTC der TU Berlin; Max-Planck-Gesellschaft und weitere

Förderung: Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (DFN); Deutsche Telekom AG

Im Rahmen des Projekts GÜTE wird allen Anwendungsprojekten des Gigabit-Testbed-Projekts Süd+Berlin in der Region Berlin/Potsdam technische Unterstützung bei ihren Projekten gegeben. Nachdem im Jahr 1999 der Schwer-

punkt bei der Inbetriebnahme des Netzes beginnend bei Messungen bzgl. der Qualitätssicherung der bereitgestellten Lichtwellenleiter, Bereitstellung von ATM-Switchen und IP-Routern und Absprachen von Adressen lag, wurden im Jahr 2000 vornehmlich Leistungsverbesserungen für einzelne Teilstrecken durchgeführt. Das Beispiel der komplizierten Verbindung der beiden Rechner von Typ Cray T3E im ZIB und bei der MPG in Garching soll hier näher dargestellt werden:

Die Weitverkehrsstrecke Berlin - Garching wird mit ATM-Protokollen betrieben, eine Bandbreite von 622 Mbit/s ist hier vorgesehen. Beide Rechner Cray T3E verfügen jedoch nicht über die notwendige OC12-ATM-Schnittstelle am Rechner. Die einzige leistungsfähige Außenanbindung ist ein HiPPI-Kanal, der mit 800 Mbit/s bedient werden kann. Vorarbeiten an der Universität Stuttgart ergaben, daß ein mit HiPPI- und ATM-Interface ausgerüsteter Gatewayrechner vom Typ SUN diese Funktion erbringen kann.

Allerdings reicht es nicht aus, diese Netzverbindung mit Standardparametern für einzelne IP-Größen festzulegen. Die erzielte Bandbreite liegt selbst beim Transfer von großen Datenpaketen zwischen den beiden Cray-T3E-Systemen (berte: ZIB, pc: MPG Garching) bei nur ca. 95 Mbit/s; dies sind weniger als 15 % der theoretischen Peakperformance von 622 Mbit/s. Nach einer längeren Test- und Experimentierzeit konnten höhere Durchsatzraten erzielt werden. Einer der kritischen Parameter ist die maximale Übertragungseinheit (MTU - Maximum Transfer Unit), welche auf allen beteiligten Geräten gleichartig und angemessen groß sein muß. Prinzipiell problematisch ist diese Vorgehensweise, da zwar in dieser speziellen Testumgebung die Übertragungseinheiten in den Netzgeräten verändert werden können, dies aber im praktischen Einsatz in Standardnetzen kaum möglich sein wird. Der Benutzer selbst kann jedoch für seine Anwendung die Puffergröße, z.B. auf der Empfangsseite selbst verändern, diese sollte eine komplette TCP-WindowSize aufnehmen können. Eine sinnvolle Größe für eine spezielle Verbindung liegt in der Größenordnung aus dem Produkt von tatsächlicher Bandbreite der Verbindung und der Turn-Around-Zeit.

Für die Verbindung Berlin – Garching haben sich Werte für die maximale Übertragungseinheit (MTU) ab 512 KByte und für die benutzerseitige Puffergröße ab 1 MByte als sinnvoll ergeben. Abbildung 4.8 stellt die während des Projektverlaufs gemessenen Datendurchsätze dar. Zwischen diesen beiden Rechnern wurde im Mai 2000 ein maximaler Wert von ca. 280 Mbit/s ermittelt. Zwischen den Gatewayrechnern (zib-sun und gigue) konnten höhere Werte von ca. 400 bis 500 Mbit/s erzielt werden.

Der zweite wichtige Meßwert für Datenübertragungen ist die Turn-Around-Zeit (Latenzzeit). Zwischen den beiden Rechnern Cray T3e wurde eine Latenzzeit von ca. 15 ms und zwischen den Sun-Gatewayrechnern von 9 ms gemessen; diese ist nur etwas größer als die durch die ca. 750 km lange Strecke bedingte Signallaufzeit

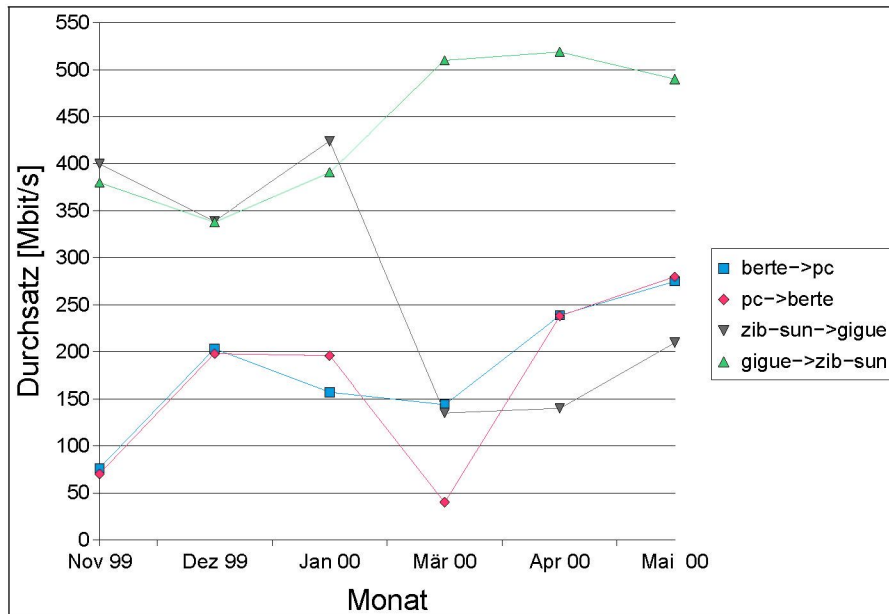


ABBILDUNG 4.8: Datendurchsatz während des Projektverlaufes

von 7,5 ms.

4.4 Norddeutscher Hochleistungsrechner (HLRN)

Den Empfehlungen des Wissenschaftsrates (Drs. 3852/99) folgend hat der HLRN-Verbund⁴, dem die sechs norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein angehören, im Dezember 1999 ein aktualisiertes Konzept zur Beschaffung eines gemeinsamen norddeutschen Höchstleistungsrechners vorgelegt. Im Januar 2000 hat die Arbeitsgruppe „Höchstleistungsrechnen“ des Wissenschaftsrates (Leitung: Prof. Spaniol) die Beschaffung zweier eng gekoppelter Hochleistungsrechner mit einer Leistung von 3 bis 5 TFlop/s für die Standorte ZIB (Berlin) und RRZN (Hannover) empfohlen. Diese Empfehlung geschah mit dem ausdrücklichen Wunsch des Wissenschaftsrates, dem HLRN-Verbund eine Perspektive zu eröffnen, sich nach erfolgreichem Betrieb der beiden Hochleistungsrechner im Jahr 2003 erneut um die Beschaffung eines Bundeshöchstleistungsrechners der 10 TFlop/s-Klasse zu bewerben.

Daraufhin haben die beiden Sitzländer Berlin und Niedersachsen zwei separate, aber eng aufeinander abgestimmte HBFGE-Anträge eingereicht, die nach umfangreichen Beratungen und einer Anhörung schließlich von der DFG zur Realisie-

⁴Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

rung vorgeschlagen wurden. Mehr noch: In ihren Empfehlungen lobt die DFG ausdrücklich das vom HLRN vorgelegte Konzept eines „virtuellen Hochleistungsrechners“, der an zwei Standorten in Berlin und Hannover - verbunden durch eine 2,4 GBit/s-Leitung - betrieben werden soll. Die beiden Systemkomplexe sollen aus massiv parallelen MP-SMP-Knoten bestehen, die als ein gemeinsames System (Abbildung 4.9) betrieben werden. Als Finanzvolumen sind je 20 Mio. DM für Hannover und Berlin vorgesehen, die von den sechs Mitgliedern des HLRN-Verbunds nach dem Königsteiner Schlüssel, einem von allen Bundesländern akzeptierten Finanzierungsschlüssel für länderübergreifende Projekte, finanziert werden.

Das langwierige Ausschreibungsverfahren wird im I. Quartal 2001 beginnen, nach der Systemauswahl im II. Quartal erwarten wir die Lieferung und Betriebsaufnahme im IV. Quartal 2001/I. Quartal 2002. Zu diesem Zeitpunkt werden wir dann endlich wieder unseren Benutzern angemessene Rechenkapazität bereitstellen können. Die jetzigen Systeme Cray J90 und Cray T3E werden anschließend nach einer kurzen Übergangszeit stillgelegt.

HLRN-System

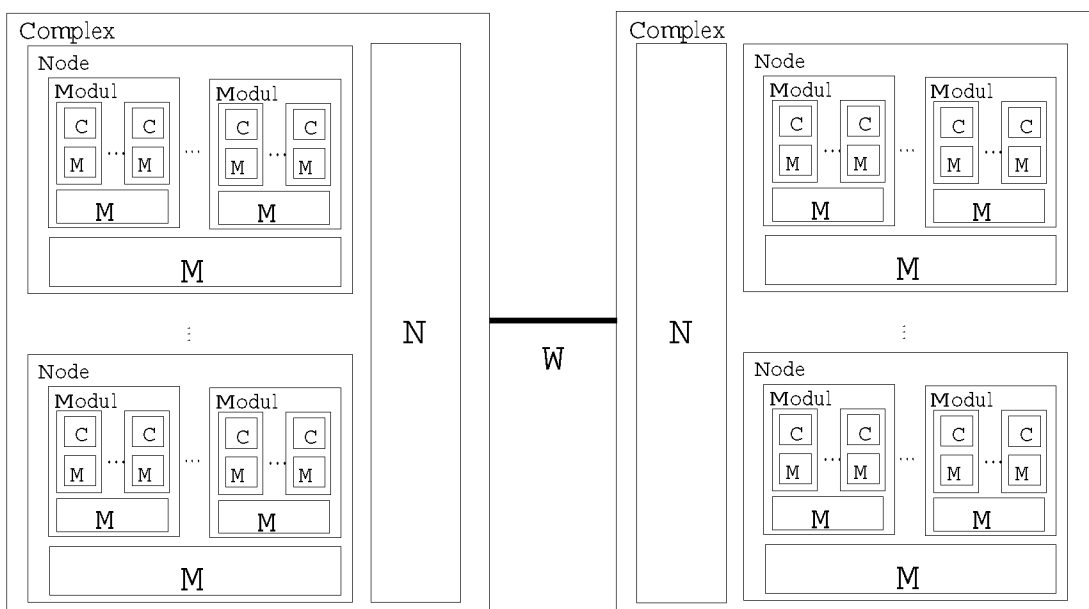


ABBILDUNG 4.9: Systemkonfiguration des „virtuellen Supercomputers HLRN“ mit den beiden massiv parallelen Komplexen in Berlin und Hannover

Publikationen

Die Veröffentlichungen sind abrufbar über

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

und/oder

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

5.1 Preprints

ZIB-Report 00-01. Rainald Ehrig; Ulrich Nowak. *Algorithmen- und Softwareoptimierung für die Satellitenbahn- und Schwerefeldmodellierung.*

Zusammenfassung: Dieser Report enthält die Ergebnisse der Untersuchungen, die gemäss dem Forschungs- und Entwicklungsvertrag **Gravity** zwischen dem GeoForschungsZentrum Potsdam und dem Konrad-Zuse-Zentrum Berlin vorgenommen wurden. Die damit vereinbarte wissenschaftliche Kooperation hat die folgenden Ziele:

- die am GFZ vorhandenen Algorithmen und Softwaremodule auf ihre Effizienz hinsichtlich Nutzung der Rechnerressourcen zu untersuchen und Lösungen für einen schnelleren Datendurchsatz zu entwickeln und zu implementieren,
- Methoden zur Regularisierung und Lösung schlecht konditionierter Normalgleichungssysteme (für Schwerefeldkoeffizienten) kritisch zu untersuchen und eine mathematisch objektive Strategie der Regularisierung zu entwickeln, und
- insbesondere im Hinblick auf die Anforderungen bei GRACE, verschiedene Bahnintegrationsverfahren hinsichtlich ihrer numerischen Genauigkeit und Einsatzmöglichkeiten zu untersuchen.

ZIB-Report 00-02. Thomas Wolf. *The Symbolic Integration of Exact PDEs.*

Abstract: An algorithm is described to decide if a given polynomial differential expression Δ of multivariate functions is exact, i.e. whether there

exists a first integral P such that $D_x P = \Delta$ for any one of a set of variables x and to provide the integral P . A generalization is given to allow integration in the case that the exactness is prohibited by terms which contain only functions of not all the independent variables.

ZIB-Report 00-03. Jens Lang; Wilhelm Merz. *Two-Dimensional Adaptive Simulation of Dopant Diffusion in Silicon.*

Abstract: One important step in the fabrication of silicon-based integrated circuits is the creation of semiconducting areas by diffusion of dopant impurities into silicon. Complex models have been developed to investigate the redistribution of dopants and point defects. In general, numerical analysis of the resulting PDEs is the central tool to assess the modelling process. We present an adaptive approach which is able to judge the quality of the numerical approximation and which provides an automatic mesh improvement. Using linearly implicit methods in time and multilevel finite elements in space, we are able to integrate efficiently the arising reaction-drift-diffusion equations with high accuracy. Two different diffusion processes of practical interest are simulated.

ZIB-Report 00-04. Alexander Fischer. *An Uncoupling-Coupling Technique for Markov Chain Monte Carlo Methods.*

Abstract: Uncoupling-coupling Monte Carlo (UCMC) combines uncoupling techniques for finite Markov chains with Markov chain Monte Carlo methodology. By determining almost invariant sets of the associated Markov operator, the Monte Carlo sampling splits by a hierarchical annealing process into the essential regions of the state space; therefore UCMC aims at avoiding the typical metastable behavior of Monte Carlo techniques. From the viewpoint of Monte Carlo, a slowly converging long-time Markov chain is replaced by a limited number of rapidly mixing short-time ones. The correct weighting factors for the various Markov chains are obtained via a coupling matrix, that connects the samplings from the different almost invariant sets. The underlying mathematical structure of this approach is given by a general examination of the uncoupling-coupling procedure.

Furthermore, the overall algorithmic scheme of UCMC is applied to the n -pentane molecule, a well-known example from molecular dynamics.

ZIB-Report 00-05. David Yevick; Tilmann Friese; Frank Schmidt. *A Comparison of Transparent Boundary Conditions for the Fresnel Equation.*

Abstract: We establish the relationship between the transparent boundary condition (BPP) of Baskakov and Popov [Wave Motion **14** (1991) 121-128] and Pakpadakis et. al. [J. Acoust. Soc. Am. **92** (1992) 2030-2038] and a second boundary condition (SDY) introduced by Schmidt and Deuffhard [Comp. Math. Appl. **29** (1995) 53-76] and Schmidt and Yevick [J. Comput. Phys. **134** (1997) 96-107], that is explicitly tailored to the form of the underlying numerical propagation scheme. Our analysis demonstrates that if

the domain is first discretized in the propagation direction, the SDY expression can be obtained by applying the exact sequence of steps used to derive the BPP procedure. The BPP method is thus an approximate realization of the computationally far simpler and unconditionally stable SDY boundary condition.

ZIB–Report 00-06. Frank Schmidt. *Discrete Nonreflecting Boundary Conditions for the Helmholtz Equation.*

Abstract: We derive exact discrete nonreflecting boundary conditions for time-harmonic scattering problems modeled by the Helmholtz equation. The main idea is to consider the exterior problem as an initial value problem with initial data given on the boundary of the computational domain. The solution of the exterior problem is obtained via Laplace transformation techniques which supply the boundary conditions in terms of discrete Dirichlet-to-Neumann operators.

ZIB–Report 00-07. Peter Deuffhard; Hans-Christian Hege; Martin Seebaß. *Progress Towards a Combined MRI/Hyperthermia System.*

Abstract: Regional hyperthermia, a clinical cancer therapy, is the main topic of the Sonderforschungsbereich “Hyperthermia: Scientific Methods and Clinical Applications” at Berlin. In recent years, technological improvements towards a better concentration of heat to the desired target region have been achieved. These include a rather sophisticated integrated software environment for therapy planning and a new hyperthermia applicator. In a next step, a detailed closed loop monitoring of the actual treatment is to be developed. For this purpose the hyperthermia applicator is combined with an MRI system, which will allow to check the positioning of the patients and to measure individual blood perfusion as well as the 3D temperature distribution.

The basic idea is to use temperature measurements directly for an on-line control of the whole treatment. In this intended setting, new fast feedback control algorithms will come into play.

ZIB–Report 00-08. Sven O. Krumke. *News from the Online Traveling Repairman.*

Abstract: The traveling repairman problem (TRP) is a variant of the famous traveling salesman problem (TSP). The objective for the TRP is to minimize the latency, that is the the weighted sum of completion times of the cities, where the completion time of a city is defined to be the time in the tour before the city is reached.

In the online traveling repairman problem (OLTRP) requests for visits to cities (points in a metric space) arrive online while the repairman is traveling. We analyze the performance of algorithms using competitive analysis, where the cost of an online algorithm is compared to that of an optimal offline algorithm. An optimal offline algorithm knows the entire request se-

quence in advance and can serve it with minimum cost.

Recently, Feuerstein and Stougie presented a 9-competitive algorithm for the OLTRP on the real line. In this paper we show how to use techniques from online-scheduling to obtain an 8-competitive deterministic algorithm which works for any metric space. We also present a randomized algorithm which has a competitive ratio of $\frac{4}{\ln 2} \approx 5.7708$ against an oblivious adversary. All of our results also hold for the “dial-a-ride” generalization of the OLTRP, where objects have to be picked up and delivered by a server.

ZIB-Report 00-09. Michiel Blom; Sven O. Krumke; Willem de Paepe; Leen Stougie. *The Online-TSP Against Fair Adversaries*.

(Appeared in: Proceedings of the 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Vol 1767 of Lecture Notes in Computer Science, Springer 2000, 137-149)

Abstract: In the online traveling salesman problem requests for visits to cities (points in a metric space) arrive online while the salesman is traveling. The salesman moves at no more than unit speed and starts and ends his work at a designated origin. The objective is to find a routing for the salesman which finishes as early as possible.

Performance of algorithms is measured through their competitive ratio, comparing the outcome of the algorithms with that of an adversary who provides the problem instance and therefore is able to achieve the optimal offline solution. Objections against such omnipotent adversaries have lead us to devise an adversary that is in a natural way, in the context of routing problems, more restricted in power.

For the exposition we consider the online traveling salesman problem on the metric space given by the non-negative part of the real line. We show that a very natural strategy is 3/2-competitive against the conventional adversary, which matches the lower bound on competitive ratios achievable for algorithms for this problem.

Against the more “*fair adversary*”, that we propose, we show that there exists an algorithm with competitive ratio $\frac{1+\sqrt{17}}{4} \approx 1.28$ and provide a matching lower bound.

We also show competitiveness results for a special class of algorithms (called zealous algorithms) that do not allow waiting time for the server as long as there are requests unserved.

ZIB-Report 00-10. Goran Konjevod; Sven O. Krumke; Madhav Marathe. *Budget Constrained Minimum Cost Connected Medians*.

(Appeared in: Proceedings of the 26th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Konstanz, Germany, Vol 1928 of Lecture Notes in Computer Science, Springer Jun 2000, 267-278)

Abstract: Several practical instances of network design problems require the network to satisfy multiple constraints. In this paper, we address the

Budget Constrained Connected Median Problem: We are given an undirected graph $G = (V, E)$ with two different edge-weight functions c (modeling the construction or communication cost) and d (modeling the service distance), and a bound B on the total service distance. The goal is to find a subtree T of G with minimum c -cost $c(T)$ subject to the constraint that the sum of the service distances of all the remaining nodes $v \in V \setminus T$ to their closest neighbor in T does not exceed the specified budget B . This problem has applications in optical network design and the efficient maintenance of distributed databases.

We formulate this problem as bicriteria network design problem, and present bicriteria approximation algorithms. We also prove lower bounds on the approximability of the problem that demonstrate that our performance ratios are close to best possible.

ZIB-Report 00-11. Beate Rusch. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Erste Erfahrungen im Produktionsbetrieb.*

(Erschienen in: Information und Öffentlichkeit: 1. Gemeinsamer Kongress der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e.V. (BDB) und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e.V. (DGI), Leipzig, 20.-23. März 2000, hrsg. von Georg Ruppelt und Horst Neisser. Wiesbaden: 2000, 301-308)

Zusammenfassung: In diesem Artikel wird der Status des Projekts Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg beschrieben, der im November 1999 mit der KOBV-Suchmaschine seinen produktiven Betrieb aufgenommen hat. Die Recherchemöglichkeiten im WWW werden erläutert, Zugriffszahlen genannt und Entwicklungsperspektiven skizziert.

Dieser Bericht entspricht der schriftlichen Fassung eines gleichnamigen Vortrages, der auf dem 1. Gemeinsamen Kongreß der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e.V. und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e.V. /it Information und Öffentlichkeit gehalten wurde, der vom 20. bis 23. März 2000 in Leipzig stattfand.

ZIB-Report 00-12. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *Asymptotic Results and a Markovian Approximation for the $M(n)/M(n)/s+GI$ System.*

Abstract: In this paper for the $M(n)/M(n)/s + GI$ system, i.e. for a s -server queueing system where the calls in the queue may leave the system due to impatience, we present new asymptotic results for the intensities of calls leaving the system due to impatience and a Markovian system approximation where these results are applied. Furthermore, we present a new proof for the formulae of the conditional density of the virtual waiting time distributions, recently given by Movaghar for the less general $M(n)/M/s + GI$ system. Also we obtain new explicit expressions for refined virtual waiting time characteristics as a byproduct.

ZIB-Report 00-13. Tobias Galliat; Peter Deuffhard. *Adaptive hierarchical cluster analysis by Self-Organizing Box Maps.*

Abstract: The present paper aims at an extension of KOHONEN'S Self-Organizing Map (SOM) algorithm to be called Self-Organizing Box Map (SOBM) algorithm; it generates box codebooks in lieu of point codebooks. Box codebooks just like point codebooks indirectly define a Voronoi tessellation of the input space, so that each codebook vector represents a unique set of points. Each box codebook vector comprises a multi-dimensional interval that approximates the related partition of the Voronoi tessellation. Upon using the automated cluster identification method that has recently been developed by the authors, the codebook vectors can be grouped in such a way that each group represents a point cluster in the input space. Since the clustering usually depends on the size of the SOM, one cannot be sure, whether the clustering comes out to be optimal. Refinement of part of the identified clusters would often improve the results. This paper presents the concept of an adaptive multilevel cluster algorithm that performs such refinements automatically. Moreover the paper introduces a concept of essential dimensions and suggests a method for their identification based on our herein suggested box codebooks. Applications of the algorithm to molecular dynamics will be described in a forthcoming paper.

ZIB-Report 00-14. Daniel Bienstock; Andreas Bley. *Capacitated Network Design with Multicast Commodities.*

(Appeared in: Proceedings in the 8th International Conference on Telecommunication Systems, March 9-12, 2000 Nashville)

Abstract: This paper addresses the problem of designing a minimum cost network whose capacities are sufficiently large to allow a feasible routing of a given set of multicast commodities. A multicast commodity consists of a set of two or more terminals that need to be connected by a so called broadcast tree, which consumes on all of its edges a capacity as large as the demand value associated with that commodity.

We model the network design problem with multicast commodities as the problem of packing capacitated Steiner trees in a graph. In the first part of the paper we present three mixed-integer programming formulations for this problem. The first natural formulation uses only one integer capacity variable for each edge and one binary tree variable for each commodity-edge pair. Applying well-known techniques from the Steiner tree problem, we then develop a stronger directed and a multicommodity flow based mixed-integer programming formulation.

In the second part of the paper we study the associated polyhedra and derive valid and even facet defining inequalities for the natural formulation. Finally, we describe separation algorithms for these inequalities and present computational results that demonstrate the strength of our extended

formulations.

ZIB-Report 00-15. Marc C. Steinbach. *Hierarchical Sparsity in Multistage Convex Stochastic Programs.*

Abstract: Interior point methods for multistage stochastic programs involve KKT systems with a characteristic global block structure induced by dynamic equations on the scenario tree. We generalize the recursive solution algorithm proposed in an earlier paper so that its linear complexity extends to a refined tree-sparse KKT structure. Then we analyze how the block operations can be specialized to take advantage of problem-specific sparse substructures. Savings of memory and operations for a financial engineering application are discussed in detail.

ZIB-Report 00-16. Michael Meyer; Thomas Steinke; Maria Brandl; Jürgen Sühnel. *Density functional study of guanine and uracil quartets and of guanine quartet metal/ion complexes.*

Abstract: The structures and interaction energies of guanine and uracil quartets have been determined by B3LYP hybrid density functional calculations. The total interaction energy ΔE^T of the C_{4h} -symmetric guanine quartet consisting of Hoogsteen type base pairs with two hydrogen bonds between two neighbour bases is -66.07 kcal/mol at the highest level. The uracil quartet with C6-H6...O4 interactions between the individual bases has only a small interaction energy of -20.92 kcal/mol and the interaction energy of -24.63 kcal/mol for the alternative structure with N3-H3...O4 hydrogen bonds is only slightly more negative. Cooperative effects contribute between 10 and 25 % to all interaction energies. Complexes of metal ions with G-quartets can be classified into different structure types. The one with Ca^{2+} in the central cavity adopts a C_{4h} -symmetric structure with coplanar bases, whereas the energies of the planar and non-planar Na^+ complexes are almost identical. The small ions Li^+ , Be^{2+} , Cu^+ and Zn^{2+} prefer a non-planar S_4 -symmetric structure. The lack of co-planarity prevents probably a stacking of these base quartets. The central cavity is too small for K^+ ions and therefore this ion favours in contrast to all other investigated ions a C_4 -symmetric complex, which is 4.73 kcal/mol more stable than the C_{4h} -symmetric one. The distance 1.665 Å between K^+ and the root mean squares plane of the guanine bases is approximately half of the distance between two stacked G-quartets. The total interaction energy of alkaline earth ion complexes exceeds the ones with alkali ions. Within both groups of ions the interaction energy decreases with an increasing row position in the periodic table. The B3LYP and BLYP methods lead to similar structures and energies. Both methods are suitable for hydrogen-bonded biological systems. Compared with the before mentioned methods the HCTH functional leads to longer hydrogen bonds and different relative energies for two U-quartets. Finally we calculated also structures and relative energies

with the MMFF94 forcefield. Contrary to all DFT methods, MMFF94 predicts bifurcated C-H...O contacts in the uracil quartet. In the G-quartet the MMFF94 hydrogen bond distances N2-H22...N7 are shorter than the DFT distances, whereas the N1-H1...O6 distances are longer.

ZIB-Report 00-17. Michael Oevermann; Rupert Klein; Marsha Berger; Jonathan Goodman. *A Projection Method for Two-Phase Incompressible Flow with Surface Tension and Sharp Interface Resolution.*

Abstract: We present a fully second order projection method for the simulation of two-phase incompressible flow with surface tension. The Navier-Stokes equations are solved with a projection method on a fixed Cartesian grid. The free interface between the two fluids is tracked with a level set approach. The conditions at the interface for the pressure, the pressure gradient, and the velocity are explicitly incorporated into the scheme leading to a sharp representation of the pressure discontinuity and the interfacial force. The scheme in the presented form does not introduce additional points in the standard finite difference stencils. Computational results are compared with analytic solutions for a static round bubble, damped surface waves, and Rayleigh-Taylor instabilities.

ZIB-Report 00-18. Arie M.C.A. Koster. *Re-Optimization of Signaling Transfer Points.*

Abstract: In this paper we describe the results of a computational study towards the (re)optimization of signaling transfer points (STPs) in telecommunication networks. The best performance of an STP is achieved whenever the traffic load is evenly distributed among the internal components. Due to the continuously changing traffic pattern, the load of the components has to be re-optimized on a regular basis. Besides the balancing objective also the number of rearrangements have to be taken into account. In this paper we present two alternative formulations to deal with both requirements. Computational results show that for both formulations (near) optimal solutions can be obtained within reasonable time limits.

ZIB-Report 00-19. Sven O. Krumke; Hartmut Noltemeier; Hans-Christoph Wirth. *Graphentheoretische Konzepte und Algorithmen.*

Zusammenfassung: Das vorliegende Skript bietet eine Einführung in die Graphentheorie und graphentheoretische Algorithmen. Im zweiten Kapitel werden Grundbegriffe der Graphentheorie vorgestellt. Das dritte Kapitel beschäftigt sich mit der Existenz von Wegen in Graphen. Hier wird auch die Lösung des berühmten Königsberger Brückenproblems aufgezeigt und der Satz von Euler bewiesen. Im vierten Kapitel wird gezeigt, wie man auf einfache Weise die Zusammenhangskomponenten eines Graphen bestimmen kann. Im Kapitel sechs wird dann später mit der Tiefensuche ein Verfahren vorgestellt, das schneller arbeitet und mit dessen Hilfe man noch mehr Informationen über die Struktur eines Graphen gewinnen kann.

In den folgenden Kapiteln werden Algorithmen vorgestellt, um minimale aufspannenden Bäume, kürzeste Wege und maximale Flüsse in Graphen zu bestimmen.

Am Ende des Skripts wird ein kurzer Einblick in die planaren Graphen und Graphhomomorphismen geboten.

ZIB-Report 00-20. Michael Meyer; Rüdiger Schnurre; Rolf Reissbrodt; Wolfgang Trowitzsch-Kienast. *Computer-aided design of novel siderophores: Pyridinochelin.*

Abstract: Pyridinochelin, a novel catecholate type siderophore, has been designed on the basis of the active analog enterobactin. Growth promotion tests indicate that this synthetic siderophore feeds various pathogenic bacteria effectively with iron even though it lacks one catecholate group compared to enterobactin. The superposition of the siderophore structures suggests that the structure of the skeleton connecting the catecholate groups might be an important factor for the iron transport.

ZIB-Report 00-21. Jens Lang; Bodo Erdmann. *Adaptive Linearly Implicit Methods for Heat and Mass Transfer Problems.*

Abstract: Dynamical process simulation of complex real-life problems often requires the use of modern algorithms, which automatically adapt both the time and space discretization in order to get error-controlled approximations of the solution. In this paper, a combination of linearly implicit time integrators of Rosenbrock type and adaptive multilevel finite elements based on a posteriori error estimates is presented. This approach has proven to work quite satisfactorily for a wide range of challenging practical problems. We show the performance of our adaptive method for two applications that arise in the study of flame balls and brine transport in porous media.

ZIB-Report 00-22. Stan P.M. van Hoesel; Arie M.C.A. Koster; Robert L.M.J. van de Leensel; Martin W.P. Savelsbergh. *Polyhedral Results for the Edge Capacity Polytope.*

Abstract: Network loading problems occur in the design of telecommunication networks, in many different settings. The polyhedral structure of this problem is important in developing solution methods for the problem. In this paper we investigate the polytope of the problem restricted to one edge of the network (the edge capacity problem).

We describe classes of strong valid inequalities for the edge capacity polytope, and we derive conditions under which these constraints define facets. As the edge capacity problem is a relaxation of the network loading problem, their polytopes are intimately related. We, therefore, also give conditions under which the inequalities of the edge capacity polytope define facets of the network loading polytope. Furthermore, some structural properties are derived, such as the relation of the edge capacity polytope to the knapsack

polytope. We conclude the theoretical part of this paper with some lifting theorems, where we show that this problem is polynomially solvable for most of our classes of valid inequalities.

In a computational study the quality of the constraints is investigated. Here, we show that the valid inequalities of the edge capacity polytope are not only important for solving the edge capacity problem, but also for the network loading problem, showing that the edge capacity problem is an important subproblem.

ZIB-Report 00-23. Joachim Lügger. *Über Suchmaschinen, Verbände und die Integration von Informationsangeboten.*

Zusammenfassung: Die Entwicklung einer bibliothekarischen Suchmaschine ist das technisch-organisatorische Herzstück des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV). Auf dem Wege über diese Innovation verfolgen die Länder Berlin und Brandenburg und ihre Bibliotheken das Ziel, ihr Bibliothekswesen zu erneuern und zu reorganisieren. Die Entwicklung der Suchmaschine ist für die Partner im KOBV-Projekt kein Selbstzweck, sondern nur Mittel zum Zweck - insbesondere, um die heterogene Welt der in Berlin und in Brandenburg eingesetzten integrierten Bibliotheksinformationssysteme harmonisch miteinander zu verbinden.

Mit der KOBV-Suchmaschine sind informationstechnische Sichtweisen und Methoden entstanden, die sich potentiell auch auf die überregionale Arbeit des KOBV auswirken können und in Kooperation mit den Bibliotheksverbänden auf die Zusammenarbeit der Verbände insgesamt. Der Artikel konzentriert sich am Beispiel der KOBV-Suchmaschine auch auf diesen Aspekt.

Auf die Bibliotheken kommen mit dem Internet und dem World Wide Web für sie neuartige Medien, Mittel und Aufgaben zu, in erster Linie aus dem Bereich der Wissenschaften und der wissenschaftlichen Fachgesellschaften. Die Herausforderung besteht darin, die neuen elektronischen Informationen und Angebote zu integrieren. Das Stichwort hierzu lautet digitale Bibliothek bzw. virtuelle Fachbibliothek. Auch zu der Diskussion um diese aktuelle Entwicklung will der Artikel einen Beitrag leisten.

ZIB-Report 00-24. Wolfram Sperber; Wolfgang Dalitz. *Portale, Search Engines und Math-Net.*

Zusammenfassung: Wie sucht ein Wissenschaftler im Internet die benötigten Informationen für seine Arbeit?

Welche relevanten Informationen gibt es überhaupt im Web?

Sind dafür solche Suchmaschinen wie AltaVista, Google oder HotBot die richtigen Werkzeuge?

Die Antwort der Mathematiker heisst Math-Net, ein Informations- und Kommunikationssystem für die Mathematik.

Math-Net besteht zunächst aus den Informationen von Personen und Insti-

tutionen, die ihre für die Mathematik relevanten Informationen dort bereitstellen wollen. Das soll i.a. auf den Web-Servern der Personen oder Institutionen geschehen. Hierin unterscheidet sich die Situation im Math-Net nicht von der im WWW insgesamt. Im Math-Net sollen aber die Informationen in einheitlicher Weise erschlossen werden. Dazu gibt es sowohl für Server als auch für die Dokumente Empfehlungen für deren Strukturierung.

Die lokalen Informationen werden dann im Math-Net durch automatische Verfahren gesammelt, ausgewertet und indexiert. Diese Indexe sind die Basis für die Math-Net Dienste. Das sind Search Engines und Portale, die einen qualifizierten und effizienten Zugang zu den Informationen im Math-Net bieten. Die Math-Net Dienste sind auf die Mathematik spezialisiert.

Im Gegensatz zu den oben erwähnten universellen Suchmaschinen decken sie nur einen winzigen Bruchteil des Web ab, aber dafür den für die Mathematik relevanten Teil.

Math-Net ist mehr als nur Search Engine oder Portal zu Informationen in der Mathematik. Es ist auch ein Informations- und Kommunikationssystem sowie ein Publikationsmedium für die Mathematik.

Die mathematische Community hat sich in der Math-Net Initiative organisiert. Diese Initiative wird von der International Mathematical Union (IMU), der weltweiten Dachorganisation der mathematischen Gesellschaften, koordiniert. Die Entwicklung des Math-Net wird von dem breiten Konsens der Mathematiker getragen, den Zugang zu der für die Mathematik relevanten Information zu erleichtern und zu verbessern.

ZIB-Report 00-25. Ernst-Michael Ilgenfritz; Werner Kerler; Michael Müller-Preussker; Hinnerk Stüben. *Parallel tempering and decorrelation of topological charge in 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 on 10^4 and 12^4 lattices. As an indicator for decorrelation the topological charge is used.

ZIB-Report 00-26. Wilhelm Huisinga. *The Essential Spectral Radius and Asymptotic Properties of Transfer Operators.*

Abstract: The statistical behavior of deterministic and stochastic dynamical systems may be described using transfer operators, which generalize the notion of Frobenius Perron and Koopman operators. Since numerical techniques to analyze dynamical systems based on eigenvalues problems for the corresponding transfer operator have emerged, bounds on its essential spectral radius became of interest. This article shows that they are also of great theoretical interest. We give an analytical representation of the essential spectral radius in $L^1(\mu)$, which then is exploited to analyze the asymptotic properties of transfer operators by combining results from functional analysis, Markov operators and Markov chain theory. In particular, it is

shown, that an essential spectral radius less than 1, constrictiveness and some “weak form” of the so-called Doeblin condition are equivalent. Finally, we apply the results to study three main problem classes: deterministic systems, stochastically perturbed deterministic systems and stochastic systems.

ZIB-Report 00-27. Detlev Stalling; Martin Seebaß; Malte Zöckler; Hans-Christian Hege. *Hyperthermia Treatment Planning with HyperPlan - User's Manual.*

Abstract: HyperPlan is a software system for performing 3D-simulations and treatment planning in regional hyperthermia. It allows the user to understand the complex effects of electromagnetic wave propagation and heat transport inside a patient's body. Optimized power amplitudes and phase settings can be calculated for the BSD radiowave applicators Sigma 60 and Sigma 2000 (eye-applicator). HyperPlan is built on top of the modular, object-oriented visualization system Amira. This system already contains powerful algorithms for image processing, geometric modelling and 3D graphics display. HyperPlan provides a number of hyperthermia-specific modules, allowing the user to create 3D tetrahedral patient models suitable for treatment planning. In addition, all numerical simulation modules required for hyperthermia simulation are part of HyperPlan. This guide provides a step-by-step introduction to hyperthermia planning using HyperPlan. It also describes the usage of the underlying visualization system Amira.

ZIB-Report 00-28. Martin Seebass; Rudolf Beck; Johanna Gellermann; Jacek Nadobny; Peter Wust. *Electromagnetic phased arrays for regional hyperthermia – optimal frequency and antenna arrangement.*

Abstract: In this paper we investigate the effects of the three-dimensional arrangement of antennas and frequency on temperature distributions that can be achieved in regional hyperthermia using an electromagnetic phased array. We compare the results of power-based and temperature-based optimization. Thus we are able to explain the discrepancies between previous studies favouring more antenna rings on the one hand and more antennas per ring on the other hand. We analyze the sensitivity of the results with respect to changes in amplitudes and phases as well as patient position. This analysis can be used for different purposes. First, it provides additional criteria for selecting the optimal frequency. Second, it can be used for specifying the required phase and amplitude accuracy for a real phased array system. Furthermore, it may serve as a basis for technological developments in order to reduce both types of sensitivities described above.

ZIB-Report 00-29. Annegret Wagler. *The Classes of Critically and Anticritically Perfect Graphs.*

Abstract: We focus on two new types of extremal graphs with respect to perfectness: critically and anticritically perfect graphs that lose their per-

fectness by simply deleting and adding an arbitrary edge, respectively. We present examples and study properties in order to compare critically and anticritically perfect graphs with minimally imperfect graphs, another type of extremal graphs with respect to perfectness.

We discuss two attempts to characterize the classes of all critically and anticritically perfect graphs and give a brief overview on classes of perfect graphs which contain critically or anticritically perfect graphs.

ZIB–Report 00-30. Florian Potra. *A path-following method for linear complementarity problems based on the affine invariant Kantorovich Theorem.*

Abstract: A path following algorithm for linear complementarity problems is presented. Given a point z that approximates a point $z(\tau)$ on the central path with complementarity gap τ , one determines a parameter $\theta \in (0, 1)$ so that this point satisfies the hypothesis of the affine invariant Kantorovich Theorem for the equation defining $z((1 - \theta)\tau)$. It is shown that θ is bounded below by a multiple of $n^{-1/2}$, where n is the dimension of the problem. Since the hypothesis of the Kantorovich Theorem is satisfied the sequence generated by Newton's method, or by the simplified Newton method, will converge to $z((1 - \theta)\tau)$. We show that the number of steps required to obtain an acceptable approximation of $z((1 - \theta)\tau)$ is bounded above by a number independent of n . Therefore the algorithm has $O(\sqrt{n}L)$ -iteration complexity. The parameters of the algorithm can be determined in such a way that only one Newton step is needed each time the complementarity gap is decreased.

ZIB–Report 00-31. Hans-Christian Hege; Andre Merzky; Stefan Zachow. *Distributed Visualization with OpenGL Vizserver: Practical Experiences.*

Abstract: The increasing demand for distributed solutions in computing technology does not stop when it comes to visualization techniques. However, the capabilities of today's applications to perform remote rendering are limited by historical design legacies. Especially the popular X11 protocol, which has been proven to be extremely flexible and useful for remote 2D graphics applications, breaks down for the case of remote 3D rendering. In this white paper, we give a short overview of *generic* remote rendering technologies available today, and compare their performance to the recently released vizserver by SGI: a network extension to the SGI OpenGL rendering engines.

ZIB–Report 00-32. Karin Gatermann. *Counting stable solutions of sparse polynomial systems in chemistry.*

Abstract: The polynomial differential system modelling the behavior of a chemical reaction is given by graphtheoretic structures. The concepts from toric geometry are applied to study the steady states and stable steady states. Deformed toric varieties give some insight and enable graph theoretic interpretations.

The importance of the circuits in the directed graph are emphasized. The counting of positive solutions of a sparse polynomial system by B. Sturmfels is generalized to the counting of stable positive solutions in case of a polynomial differential equation. The generalization is based on a method by sparse resultants to detect whether a system may have a Hopf bifurcation. Special examples from chemistry are used to illustrate the theoretical results.

ZIB-Report 00-33. Florian Schintke. *Ermittlung von Programmlaufzeiten anhand von Speicherzugriffen, Microbenchmarks und Simulation von Speicherhierarchien.*

Zusammenfassung: Kostenmodelle dienen der Ermittlung von Programmlaufzeiten, zum Vergleich der Effizienz von Algorithmen und zur Analyse des Verhaltens von Speicherhierarchien. Ein neuartiges Kostenmodell ist das Latency-of-Data-Access (LDA) Modell, das mehrere hierarchische Speicherebenen mit unterschiedlichen Latenzzeiten berücksichtigt. In dieser Diplomarbeit wird ein Simulator für Speicherhierarchien präsentiert, der die Berechnung von Programmausführungszeiten nach dem LDA-Modell erlaubt. Mit Hilfe des Simulators wird die These geprüft, daß mit diesem Modell die Ausführungszeit eines Programms adäquat abgeschätzt werden kann. Mit dem Simulator ist es erstmals praktikabel möglich, Programmausführungszeiten nach dem LDA-Modell zu bestimmen. Der Simulator kann für Systeme mit unterschiedlichen Speicherarchitekturen konfiguriert werden und unterstützt Mehrprozessorsysteme mit gemeinsamem Speicher (SMP-Systeme) mit verschiedenen Kohärenzprotokollen. Der Simulator kann mit den Ergebnissen von Microbenchmarks konfiguriert werden, die die Architekturparameter einer Speicherhierarchie messen.

Die Ergebnisse bestätigen die These nicht nur für Einzelprozessorsysteme, sondern auch für SMP-Systeme, wo gleichzeitig interagierende Prozessoren gegenseitig ihre Zugriffssequenz auf Zwischenspeicher beeinflussen. Zusätzlich wurde eine neue Einsatzmöglichkeit des LDA-Modells entwickelt, um die Ausführungszeit von Programmteilen zu bestimmen. Einzelne Zugriffskosten können einem mehrerer parallel laufender Modelle zugeordnet werden. Dadurch können Kosten, die Zugriffe auf einzelne Speicherbereiche verursachen, separat bestimmt werden. Diese Profiling-Technik erlaubt Optimierungen an Datenstrukturen und Speicherzugriffsmustern durch präzise und gezielte Informationsproduktion.

ZIB-Report 00-34. Christoph Helmberg. *Semidefinite Programming for Combinatorial Optimization.*

Abstract: This book offers a self-contained introduction to the field of semidefinite programming, its applications in combinatorial optimization, and its computational methods.

We equip the reader with the basic results from linear algebra on positive

semidefinite matrices and the cone spanned by them. Starting from linear programming, we introduce semidefinite programs and discuss the associated duality theory. We then turn to semidefinite relaxations of combinatorial optimization and illustrate their interrelation.

In the second half we deal with computational methods for solving semidefinite programs. First, the interior point approach, its iteration complexity, and implementational issues are discussed. Next, we explain in great detail the spectral bundle method, which is particularly suited for large scale semidefinite programming.

One of the most successful techniques in integer linear programming is the cutting plane approach which improves an initial relaxation by adding violated inequalities. We explore possibilities to combine the two solution methods with the cutting plane approach in order to strengthen semidefinite relaxations of combinatorial optimization problems.

ZIB-Report 00-35. Christoph Helmberg. *SBmethod — A C++ Implementation of the Spectral Bundle Method. Manual to Version 1.1.*

Abstract: *SBmethod*, Version 1.1, is an implementation of the spectral bundle method for eigenvalue optimization problems of the form

$$\min_{y \in \mathbf{R}^m} a \lambda_{\max}(C - \sum_{i=1}^m A_i y_i) + b^T y.$$

The design variables y_i may be sign constrained, C and A_i are given real symmetric matrices, $b \in \mathbf{R}^m$ allows to specify a linear cost term, and $a > 0$ is a constant multiplier for the maximum eigenvalue function $\lambda_{\max}(\cdot)$. The code is intended for large scale problems and allows to exploit structural properties of the matrices such as sparsity and low rank structure.

The manual contains instructions for installation and use of the program. It describes in detail input format, options, and output. The meaning of the variables and parameters is made precise by relating them to a mathematical description of the algorithm in pseudocode.

ZIB-Report 00-36. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka. *Stable Multi-Sets.*

Abstract: In this paper we introduce a generalization of stable sets: stable multi-sets. A stable multi-set is an assignment of integers to the vertices of a graph, such that specified bounds on vertices and edges are not exceeded. In case all vertex and edge bounds equal one, stable multi-sets are equivalent to stable sets.

For the stable multi-set problem, we derive reduction rules and study the associated polytope. We state necessary and sufficient conditions for the extreme points of the linear relaxation to be integer. These conditions generalize the conditions for the stable set polytope. Moreover, the classes of

odd cycle and clique inequalities for stable sets are generalized to stable multi-sets and conditions for them to be facet defining are determined.

The study of stable multi-sets is initiated by optimization problems in the field of telecommunication networks. Stable multi-sets emerge as an important substructure in the design of optical networks.

ZIB-Report 00-37. Thorsten Koch; Alexander Martin; Stefan Voß. *SteinLib: An Updated Library on Steiner Tree Problems in Graphs.*

Abstract: In this paper we present the *SteinLib*, a library of data sets for the Steiner tree problem in graphs. This library extends former libraries on Steiner tree problems by many new interesting and difficult instances, most of them arising from real-world applications. We give a survey on the difficulty of these problem instances by giving references to state-of-the-art software packages that were the first or are currently among the best to solve these instances.

ZIB-Report 00-38. Axel Keller and Alexander Reinefeld. *Anatomy of a Resource Management System for HPC-Clusters.*

Abstract: Workstation clusters are often not only used for high-throughput computing in time-sharing mode but also for running complex parallel jobs in space-sharing mode. This poses several difficulties to the resource management system, which must be able to reserve computing resources for exclusive use and also to determine an optimal process mapping for a given system topology.

On the basis of our CCS software, we describe the anatomy of a modern resource management system. Like Codine, Condor, and LSF, CCS provides mechanisms for the user-friendly system access and management of clusters. But unlike them, CCS is targeted at the effective support of space-sharing parallel and even metacomputers. Among other features, CCS provides a versatile resource description facility, topology-based process mapping, pluggable schedulers, and hooks to metacomputer management.

ZIB-Report 00-39. Monika Kuberek. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Konzept, Erfahrungen, Ausblick -*

Zusammenfassung: Der Aufsatz ist die ausgearbeitete Fassung eines Vortrages, gehalten auf dem 2. BSZ-Kolloquium des Bibliotheksservice-Zentrums Baden-Württemberg (BSZ) am 10. Oktober 2000 in Konstanz.

Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg, kurz KOBV, ist ein sehr junger Verbund - genauer gesagt, befindet er sich im Oktober 2000 immer noch in der Aufbauphase. Das KOBV-Projekt hat am 01. April 1997 begonnen und wird am 31. Dezember 2000 enden. Ab 2001 wird der KOBV in eine institutionalisierte Form überführt, die - wie bereits das Projekt - am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) - angesiedelt wird.

Mit dem KOBV wurde ein in technischer wie auch in organisatorischer

Hinsicht neuartiger Bibliotheksverbund aufgebaut, der auf der „Internetphilosophie“ basiert: Den technischen Kern bildet eine eigens entwickelte Suchmaschine; die Organisation ist dezentral ausgerichtet und gründet sich auf der Kooperation der KOBV-Partner. In dem Vortrag werden das technische und das organisatorische Verbundkonzept vorgestellt, über die Erfahrungen nach einjähriger Betriebsdauer berichtet und ein kurzer Ausblick darüber gegeben, wie es mit dem KOBV weitergeht.

ZIB-Report 00-40. Marc C. Steinbach. *Autos, Ziegen und Streithähne.*

Abstract: Das aus den Medien bekannte umstrittene Ziegenproblem (auch Drei-Türen-Problem genannt) wird vollständig analysiert und gelöst.

In der Streitfrage spielen sprachliche Mehrdeutigkeiten der Problemformulierung eine wesentliche Rolle; zudem werden Zufallsereignisse mit willkürlicher Information über deren Ergebnisse verwechselt. Tatsächlich erweisen sich beide strittigen Lösungen als teilweise richtige Bestandteile der Gesamtlösung. Die Argumentation wird in allgemeinverständlicher Sprache geführt und anschliessend durch eine formale mathematische Betrachtung ergänzt.

ZIB-Report 00-41. Sebastian Heidl; Ralf Staudemeyer. *Implementation von WAP-Diensten für die SGI/CRAY T3E des ZIB.*

Zusammenfassung: Die zunehmende Verfügbarkeit von mobilen Geräten, die mit einem Internetanschluß ausgerüstet sind, bringt auch eine steigende Nachfrage nach Informationsdiensten für diese Art von Clients mit sich. Das ZIB stellt mit seinem Höchstleistungsrechner vom Typ SGI/CRAY T3E Wissenschaftlern große Rechenkapazitäten zur Verfügung. Im Rahmen dieser Studienarbeit wurde ein WAP-Interface zur T3E entwickelt, das es den Nutzern ermöglicht, über ein mobiles, WAP-fähiges Gerät Informationen zur Betriebsbereitschaft und zur Auslastung des Höchstleistungsrechners, sowie Informationen zu den von ihnen in Auftrag gegebenen Rechenjobs abzurufen.

Die Untersuchung der aktuellen Möglichkeiten in der mobilen Kommunikation brachte einige Einschränkungen für das geplante Informationsangebot mit sich. So mußte auf Grund von Sicherheitsbedenken auf eine tatsächliche Interaktionsmöglichkeit (z.B. neue Rechenjobs zu starten) verzichtet werden. Demgegenüber konnte gezeigt werden, daß die Bereitstellung der gleichen Informationen für unterschiedliche Arten von Clients (WWW-Browser → HTML, WAP-Browser → WML) durch die Verwendung von XML als internes Datenformat problemlos möglich ist. Es hat sich gezeigt, daß die Bereitstellung eines WAP-Informationsdienstes auf Grund verschiedener Inkompatibilitätsprobleme (verschiedene Gateways, verschiedene WAP-Browser) mit erheblichem Aufwand verbunden sein kann. An dieser Stelle besteht noch Handlungsbedarf seitens der Hersteller dieser Softwarepakete.

ZIB-Report 00-42. Monika Kuberek; Monika Lill; Stefan Lohrum; Beate Rusch. *Spezifikation der Schnittstelle zwischen KOBV-Suchmaschine und Lokalsystemen.*

Zusammenfassung: Die Kommunikation zwischen der KOBV-Suchmaschine und entfernten Bibliotheksinformationssystemen unterschiedlicher Hersteller wird über das Standardprotokoll Z39.50 abgewickelt. Die Suchmaschine ermöglicht Online-Recherchen in lokalen Bibliotheksinformationssystemen, die dazu ein Z39.50 Target (Server) zur Verfügung stellen müssen. Die Suchmaschine liefert ihre Daten ebenfalls über Z39.50 aus. Ein Lokalsystem benötigt hierfür einen Z39.50 Origin (Client).

In dem Papier wird die Schnittstelle zwischen der KOBV-Suchmaschine und lokalen Bibliothekssystemen spezifiziert: Es werden die grundlegenden Anforderungen an Lokalsysteme definiert und die Konfigurationsparameter für die Z39.50-Kommunikation zwischen KOBV-Suchmaschine und Lokalsystemen beschrieben.

ZIB-Report 00-43. Martin Grötschel; Monika Kuberek; Monika Lill; Stefan Lohrum; Joachim Lügger; Beate Rusch. *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV).*

Zusammenfassung: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) wurde in den Jahren 1997-2000 im Rahmen eines wissenschaftlichen Projektes eingerichtet. Er stellt eine neuartige Form von Bibliotheksverbund dar. Sein technisches Konzept und sein organisatorischer Aufbau basieren auf der Internetphilosophie. Den informationstechnischen Kern bildet eine Suchmaschine, die die heterogenen lokalen Bibliothekssysteme miteinander verbindet. Die KOBV-Organisation ist dezentral. Sie wird getragen von der Kooperation der Bibliotheken in Berlin und Brandenburg; diese werden von einer kleinen Verbundzentrale unterstützt.

Die KOBV-Suchmaschine ist unter: <http://www.kobv.de/suche/> zu erreichen.

ZIB-Report 00-44. Martin Grötschel. *Mathematik in der Industrie: interessante Branchen und zukünftige Einsatzfelder.*

Zusammenfassung: Dieser kurze Artikel hat keine umfassende Übersicht zum Ziel. Basierend auf eigenen Erfahrungen durch Projekte mit Industriefirmen möchte ich einige Branchen erwähnen, bei denen nach meiner Einschätzung Mathematik in Zukunft zunehmend Anwendung finden wird. Ich werde das anhand konkreter Beispiele erläutern. Mathematik ersetzt in der Regel traditionelle Analyse-, Planungs- und Entwurfstechniken. Den (nicht leichten) Schritt zum Einsatz mathematischer Methoden macht ein Praktiker nur, wenn es sich für ihn "lohnt". Wann sich dies lohnt, ist schwer abzuschätzen. Man kann aber einige Indikatoren dafür finden, ob eine Branche für den Einsatz von Mathematik "reif" ist. Ob es dann dazu kommt,

hängt von vielen Faktoren ab, nicht zuletzt von der Psychologie und dem sozialen Umfeld der beteiligten Personen sowie der Bereitschaft, sich auf ein so schwieriges Terrain zu begeben und Kompromisse einzugehen. Gerade letzteres fällt Mathematikern gelegentlich schwer.

ZIB-Report 00-45. Jörg Rambau. *Circuit Admissible Triangulations of Oriented Matroids.*

Abstract: All triangulations of euclidean oriented matroids are of the same PL-homeomorphism type by a result of Anderson. That means all triangulations of euclidean acyclic oriented matroids are PL-homeomorphic to PL-balls and that all triangulations of totally cyclic oriented matroids are PL-homeomorphic to PL-spheres. For non-euclidean oriented matroids this question is wide open.

One key point in the proof of Anderson is the following fact: for every triangulation of a euclidean oriented matroid the adjacency graph of the set of all simplices “intersecting” a segment $[p_-p_+]$ is a path. We call this graph the $[p_-p_+]$ -adjacency graph of the triangulation.

While we cannot solve the problem of the topological type of triangulations of general oriented matroids we show in this note that for every circuit admissible triangulation of an arbitrary oriented matroid the $[p_-p_+]$ -adjacency graph is a path.

ZIB-Report 00-46. Jörg Rambau. *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern.*

Zusammenfassung: Dieser Report wurde im Sommersemester 2000 an der TU Berlin in einer Spezialvorlesung über Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern als Skriptum verwendet.

Nach einem motivierenden Kapitel werden grundlegende Begriffe und Konstruktionen in der Theorie der Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern vorgestellt.

Danach werden als weiterführende Themen reguläre Triangulierungen, Sekundärpolytope, bistellare Operationen, höhere Stasheff-Tamari-Halbordnungen und Triangulierungen mit wenigen bzw. gar keinen Flips behandelt.

Ein Kapitel über Enumeration und Optimierung beschließt die Zusammenstellung.

ZIB-Report 00-47. Andreas Eisenblätter; Martin Grötschel; Arie M.C.A. Koster. *Frequency Planning and Ramifications of Coloring.*

Abstract: This paper surveys frequency assignment problems coming up in planning wireless communication services. It particularly focuses on cellular mobile phone systems such as GSM, a technology that revolutionizes communication. Traditional vertex coloring provides a conceptual framework for the mathematical modeling of many frequency planning problems. This basic form, however, needs various extensions to cover technical and

organizational side constraints. Among these ramifications are T -coloring and list coloring. To model all the subtleties, the techniques of integer programming have proven to be very useful.

The ability to produce good frequency plans in practice is essential for the quality of mobile phone networks. The present algorithmic solution methods employ variants of some of the traditional coloring heuristics as well as more sophisticated machinery from mathematical programming. This paper will also address this issue.

Finally, this paper discusses several practical frequency assignment problems in detail, states the associated mathematical models, and also points to public electronic libraries of frequency assignment problems from practice. The associated graphs have up to several thousand nodes and range from rather sparse to almost complete.

ZIB-Report 00-48. Andreas Bley; Thorsten Koch. *Optimierung in der Planung und beim Aufbau des G-WiN*. (Erschienen in: DFN-Mitteilungen H. 54, 2000, 13-15)

Zusammenfassung: Ende Juni diesen Jahres wurde das Gigabit-Wissenschaftsnetz offiziell gestartet. In der zweijährigen Vorbereitungsphase wurden nicht nur die technischen Möglichkeiten der neuen Übertragungstechniken und Dienste getestet. Es wurden auch verschiedene Fragestellungen zum effizienten Einsatz der verfügbaren Ressourcen für den Betrieb des G-WiN untersucht. In diesem Artikel beschreiben wir, wie das G-WiN zu seiner jetzigen Struktur und Topologie gekommen ist.

ZIB-Report 00-49. Annegret Wagler. *Critical and Anticritical Edges in Perfect Graphs*.

Abstract: We call an edge e of a perfect graph G critical if $G - e$ is imperfect and say further that e is anticritical with respect to the complementary graph \overline{G} . We ask in which perfect graphs critical and anticritical edges occur and how to find critical and anticritical edges in perfect graphs.

Finally, we study whether we can order the edges of certain perfect graphs such that deleting all the edges yields a sequence of perfect graphs ending up with a stable set.

ZIB-Report 00-50. Oliver Sander; Daniel Runge. *Fast Surface Reconstruction Using a Probe Sphere*.

Abstract: We introduce a new method for reconstructing a triangular surface from an unorganized set of points in space. It is based on placing a probe sphere on the point set and rolling it around, connecting all triples of points with a triangle that the sphere comes to rest on. Therefore, the algorithm interpolates, rather than approximates, the input points. The method needs considerably less running time than previous algorithms and yields good results on point sets that are reasonably well-behaved.

ZIB-Report 00-51. Tobias Galliat; Peter Deuffhard; Rainer Roitzsch; Frank Cordes. *Automatic Identification of Metastable Conformations via Self-Organized Neural Networks.*

Abstract: As has been shown recently, the identification of *metastable* chemical conformations leads to a Perron cluster eigenvalue problem for a reversible Markov operator. Naive discretization of this operator would suffer from combinatorial explosion. As a first remedy, a pre-identification of essential degrees of freedom out of the set of torsion angles had been applied up to now. The present paper suggests a different approach based on neural networks: its idea is to discretize the Markov operator via self-organizing (box) maps. The thus obtained box discretization then serves as a prerequisite for the subsequent Perron cluster analysis. Moreover, this approach also permits exploitation of additional structure within embedded simulations. As it turns out, the new method is fully automatic and efficient also in the treatment of biomolecules. This is exemplified by numerical results.

ZIB-Report 00-52. Hinnerk Stüben. *Hadron masses from dynamical, non-perturbatively $O(a)$ improved Wilson fermions.*

Abstract: We present results on light hadron masses from simulations of full QCD and report on experiences in running such simulations on a Hitachi SR8000-F1 supercomputer.

ZIB-Report 00-53. Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Steffen Weider. *An Approximation Algorithm for the Non-Preemptive Capacitated Dial-a-Ride Problem.*

Abstract: In the Capacitated Dial-a-Ride Problem (CDARP) we are given a transportation network and a finite set of transportation jobs. Each job specifies the source and target location which are both part of the network. A server which can carry at most C objects at a time can move on the transportation network in order to process the transportation requests. The problem CDARP consists of finding a shortest transportation for the jobs starting and ending at a designated start location.

In this paper we are concerned with the restriction of CDARP to graphs which are simple paths. This setting arises for instance when modelling applications in elevator transportation systems. It is known that even for this restricted class of graphs CDARP is NP-hard to solve. We provide a polynomial time approximation algorithm that finds a transportation of length at most thrice the length of the optimal transportation.

ZIB-Report 00-54. Frank Schmidt; Tilmann Friese; Lin Zschiedrich; Peter Deuffhard. *Adaptive Multigrid Methods for the Vectorial Maxwell Eigenvalue Problem for Optical Waveguide Design.*

Abstract: This paper has been motivated by the need for a fast robust adaptive multigrid method to solve the vectorial Maxwell eigenvalue problem arising from the design of optical chips. Our nonlinear multigrid methods

are based on a previous method for the scalar Helmholtz equation, which must be modified to cope with the null space of the Maxwell operator due to the divergence condition. We present two different approaches. First, we present a multigrid algorithm based on an edge element discretization of time-harmonic Maxwell's equations, including the divergence condition. Second, an explicit elimination of longitudinal magnetic components leads to a nodal discretization known to avoid discrete *spurious modes* also and a vectorial eigenvalue problem, for which we present a multigrid solver. Numerical examples show that the edge element discretization clearly outperforms the nodal element approach.

ZIB-Report 00-55. Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Online Optimierung.*

Abstract: Wie soll man einen Aufzug steuern, wenn man keine Informationen über zukünftige Fahraufträge besitzt? Soll man eine Bahncard kaufen, wenn die nächsten Bahnreisen noch unbekannt sind?

In der klassischen kombinatorischen Optimierung geht man davon aus, daß die Daten jeder Problem Instanz vollständig gegeben sind. In vielen Fällen modelliert diese *Offline-Optimierung* jedoch die Situationen aus Anwendungen nur ungenügend. Zahlreiche Problemstellungen in der Praxis sind in natürlicher Weise *online*: Sie erfordern Entscheidungen, die unmittelbar und ohne Wissen zukünftiger Ereignisse getroffen werden müssen.

Als ein Standardmittel zur Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich die *kompetitive Analyse* durchgesetzt. Dabei vergleicht man den Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung. Mit Hilfe der kompetitiven Analyse werden im Skript Algorithmen zum Caching, Netzwerk-Routing, Scheduling und zu Transportaufgaben untersucht. Auch die Schwächen der kompetitiven Analyse werden aufgezeigt und alternative Analysekonzepte vorgestellt.

Neben der theoretischen Seite werden auch die Anwendungen der Online-Optimierung in der Praxis, vor allem bei Problemen der innerbetrieblichen Logistik, beleuchtet. Bei der Steuerung automatischer Transportsysteme tritt eine Fülle von Online-Problemen auf. Hierbei werden an die Algorithmen oftmals weitere Anforderungen gestellt. So müssen Entscheidungen unter strikten Zeitbeschränkungen gefällt werden (Echtzeit-Anforderungen). Dieses Skript ist aus dem Online-Teil der Vorlesung "Ausgewählte Kapitel aus der ganzzahligen Optimierung" (Wintersemester 1999/2000) und der Vorlesung "Online Optimierung" (Sommersemester 2000) an der Technischen Universität Berlin entstanden.

ZIB-Report 00-56. Stefan Volkwein; Martin Weiser. *Affine Invariant Convergence Analysis for Inexact Augmented Lagrangian-SQP Methods.*

Abstract: An affine invariant convergence analysis for inexact augmented Lagrangian-SQP methods is presented. The theory is used for the construction of an accuracy matching between iteration errors and truncation errors,

which arise from the inexact linear system solves. The theoretical investigations are illustrated numerically by an optimal control problem for the Burgers equation.

ZIB-Report 00-57. Martin Grötschel; Irene Fonseca; Mark Davis. *Round Table: The Impact of Mathematical Research on Industry and Vice Versa.*

Abstract: This paper is a summary of the Round Table: “The Impact of Mathematical Research on Industry and Vice Versa” held at 3ecm in Barcelona on July 11, 2000.

The round table started with contributions of the three panelists. Irene Fonseca, the panel chair, opened the discussion by stating six questions addressing the main issues of the round table topic. She presented the panel’s answers to these questions, drawing on many examples from her own academic experience.

In the following additional presentations, the other two panel members added further points of view based on their personal involvement with industry. The round table ended with a lively discussion with members from the audience.

This written summary of the oral presentations follows the structure of the round table indicated above.

ZIB-Report 00-58. Martin Grötschel. *Frequency Assignment in Mobile Phone Systems.*

Abstract: Wireless communication networks employ radio frequencies to establish communication links.

The available radio spectrum is very limited. To meet today’s radio communication demand, this resource has to be administered and reused carefully in order to control mutual interference. The reuse can be organized via separation in space, time, or frequency, for example. The problem, therefore, arises to distribute frequencies to links in a “reasonable manner”. This is the basic form of the frequency assignment problem. What “reasonable” means, how to quantify this measure of quality, which technical side constraints to consider cannot be answered in general. The exact specification of this task and its mathematical model depend heavily on the particular application considered.

In this paper we discuss this issue with respect to the GSM standard for mobile communication.

5.2 Mitherausgabe von Publikationen

Peter Deuffhard

- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Beijing

- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science
- Numerische Mathematik, Springer International
- Computing and Visualization in Science, Springer-Verlag

Martin Grötschel

- Computing
- Computational and Applied Mathematics
- Mathematical Programming A
- Mathematical Methods of Operations Research
- Mathematics of Operations Research
- OR Transactions
- SIAM Journal on Discrete Mathematics
- Surveys on Mathematics for Industry

Hans-Christian Hege

- VideoMATH, Springer-Verlag
<http://www.springer.de/math/livingmath>
- Mathematics and Visualization, Springer-Verlag
<http://www.springer.de/math/contact/peters/mathvisu.html>

5.3 Beiträge in Zeitschriften/Tagungsbänden

1. N. Ascheuer, M. Fischetti und M. Grötschel, *A Polyhedral Study of the Asymmetric Traveling Salesman Problem with Time Windows* In: NETWORKS, Vol. 36 (2) 2000, 69–79.
2. R. Baraglia, D. Laforenza, A. Keller, A. Reinefeld, *RsdEditor: A Graphical User Interface for Specifying Metacomputer Components*, Procs. of the 9th Heterogeneous Computing Workshop at IPDPS, May 2000 Cancun, Mexico.
3. R. Beck, R. Hiptmair, R. H. W. Hoppe und B. Wohlmuth, *Residual based a posteriori error estimators for eddy current computation*, Math. Model. Numer. Anal. **34** (2000), 159–182.
4. Werner Benger, Hans-Christian Hege, André Merzky, Thomas Radke, Edward Seidel, *Efficient Distributed File I/O for Visualization in Grid Environments*, in B. Engquist, L. Johnsson, M. Hammill, F. Short (eds.) *Simulation and Visualization on the Grid*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 13, Springer-Verlag, 2000, pp. 1-16.

5. Werner Benger, Hans-Christian Hege, Stefan Heusler, *Visions of Numerical Relativity*, in Proc. Science and Art 2000 (SCART 2000) - 3rd Int. Conf. on the Interaction of Art and Fluid Mechanics, Zürich, 2000.
6. D. Bienstock und A. Bley, *Capacitated network design with multicast commodities*, 8th International Conference on Telecommunication Systems: Modeling and Analysis, 2000, 575–599.
7. A. Björner und F. H. Lutz, *Simplicial manifolds, bistellar flips and a 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere*, Exp. Math. **9** (2000), 275–289.
8. A. Bley und T. Koch, *Optimierung des G-WiN*, DFN-Mitteilungen, Heft 54, November 2000, 13–15.
9. R. Borndörfer, M. Grötschel, A. Löbel, *Der schnellste Weg zum Ziel*. In: M. Aigner, E. Behrends (Hrsg.), *Alles Mathematik*, Friedrich Vieweg & Sohn Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 2000, 45–76.
10. R. Borndörfer, R. Weismantel, *Set packing relaxations of some integer programs*, Mathematical Programming **88** (2000), 425–450.
11. M. Brandl, M. Meyer, J. Sühnel, *Water-Mediated Base Pairs in RNA: A Quantum-Chemical Study*, J. Phys. Chem. A **104** (2000), 11177–11187.
12. P. Deuffhard, *Differential Equations in Technology and Medicine. Computational Concepts, Adaptive Algorithms, and Virtual Labs*. In: R. Burkard, P. Deuffhard, A. Jameson, G. Strang, J.L. Lions, V. Capasso, H. Engl, J. Periaux (eds.), Computational Mathematics Driven by Industrial Problems. Lecture Notes in Mathematics 1739, Springer-Verlag, pp. 69–125 (2000).
13. P. Deuffhard, *Therapieplanung an virtuellen Krebspatienten*. In: M. Aigner, E. Behrends (Hrsg.), *Alles Mathematik*, Friedrich Vieweg & Sohn Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 2000, 22–30.
14. P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, Ch. Schütte, *Identification of Almost Invariant Aggregates in Reversible Nearly Uncoupled Markov Chains*. Lin. Alg. Appl. **315**, pp. 39–59 (2000).
15. Peter Deuffhard, Martin Weiser, Martin Seebaß, *A New Nonlinear Elliptic Multilevel FEM Applied to Regional Hyperthermia*, Comput. Visual. Sci., vol. 3, 2000, pp. 1–6.
16. Peter Deuffhard, Hans-Christian Hege, Martin Seebaß, *Progress Towards a Combined MRI/Hyperthermia System*. In: W.W. Grönemeyer (ed) Proc. Second Int. Congress HIGH CARE 2000, Bochum, 2000.
17. P. Edelman, J. Rambau und V. Reiner, *On subdivision posets of cyclic polytopes*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 85–101.

18. O. E. Flippo, A. W. J. Kolen, A. M. C. A. Koster, and R. L. M. J. van de Leensel, *A dynamic programming algorithm for the local access telecommunication network expansion problem*, European Journal of Operational Research **127** (2000), 189–202.
19. T. Galliat, W. Huisinga and P. Deuffhard, *Self-Organizing Maps Combined with Eigenmode Analysis for Automated Cluster Identification.*, Proceedings of the 2nd International ICSC Symposium on Neural Computation, Berlin, 2000, pp. 227-232.
20. 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. **47:4**, 2000, pp. 1145-1156.
21. M. Grötschel, *Frequency Assignment in Mobile Phone Systems*, In: Lecture Notes in Computer Science, 1974; FST TCS 2000: Foundations of Software Technology and Theoretical Computer Science, Kapoor, Prasad (Hrsg.), Dezember 2000, 81–86.
22. Hans-Christian Hege, *Virtuelle Experimente*, in P. Bexte, G. Sievernich (Hrsg.), KERN. Gene, Hirne, Magma, Quarks: Innenansichten der Zukunft. Katalog zur Ausstellung „7 Hügel: Bilder und Zeichen des 21. Jahrhunderts“, Henschel Verlag, Berlin, 2000.
23. Hans-Christian Hege, Werner Benger, André Merzky, Friedbert Kasper, Thomas Radke, Edward Seidel, *Schwarze Löcher in Sicht - Immersive Überwachung und Steuerung von Remote-Simulationen*, DFN-Mitteilungen **52**, 2000, pp. 4-6.
24. C. Helmberg, *Fixing variables in semidefinite relaxations*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. **21** (2000), Nr. 3, 952–969.
25. C. Helmberg und F. Rendl, *A spectral bundle method for semidefinite programming*, SIAM J. Optim. **10** (2000), Nr. 3, 673–696.
26. C. Helmberg, F. Rendl und R. Weismantel, *A semidefinite programming approach to the quadratic knapsack problem*, J. of Combinatorial Optimization **4** (2000), Nr. 2, 197–215.
27. B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Journal of the European Mathematical Society **2** (2000), 179–198.
28. J. J. Johnston, R. I. Kelley, T. O. Crawford, D. H. Morton, R. Agarwala, T. Koch, A. A. Schäffer, C. A. Francomano und L. G. Biesecker, *A novel nemaline myopathy in the Amish caused by a mutation in troponin T1*, American Journal of Human Genetics, October 2000, 814–821.

29. E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler and H. Stüben, *Decorrelation of the topological charge in tempered Hybrid Monte Carlo simulations of QCD*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **83** (2000), 831–833.
30. W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, Periodica Math. Hung. **39** (1999), 161–183.
31. J. Lang, *Adaptive Multilevel Solutions of Nonlinear Parabolic PDE Systems*, in: P. Neittaanmäki, T. Tiihonen, P. Tarvainen (eds.), Numerical Mathematics and Advanced Applications, 141–145 (World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong 2000)
32. J. Lang, *Adaptive Linearly Implicit Methods in Dynamical Process Simulation*, in: E. Oñate, G. Bugeda, B. Suárez (eds.), Proceedings of European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Barcelona, CD–Rom, 2000
33. M.J. Lourenco, S.C.S. Rosa, C.A. Nieto de Castro, C. Albuquerque, B. Erdmann, J. Lang, R. Roitzsch, *Simulation of the Transient Heating in an Unsymmetric Coated Hot–Strip Sensor with a Self–Adaptive Finite Element Method*, Int. J. Thermophysics **21** (2000) 377–384
34. J. Lügger, *Über Suchmaschinen, Verbünde und die Integration von Informationsangeboten : Teil I: KOBV-Suchmaschine und Math-Net*, in ABI Technik **20** (2000), Heft 2, S. 132 - 156.
35. A. Merzky, A. Reinefeld, *High-Performance Computing on German Gigabit WANs*, ISTHMUS 2000: Research and Development for the Information Society, Poznan 2000, pp. 39-43.
36. M. Meyer, *Ab initio Study of Flavonoids*, Int. J. Quantum. Chem. **76** (2000), 724-732.
37. J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes I*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 65–83.
38. A. Reinefeld, H. Stüben, T. Steinke, W. Baumann, *Models for Specifying Distributed Computer Resources in UNICORE*, in: ISTHMUS 2000 — Research and Development for the Information Society, Institut Informatyki Politechnika Poznańska, 2000, 313–320.
39. B. Rusch, *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg: Erste Erfahrungen im Produktionsbetrieb*. In: Information und Öffentlichkeit: 1. Gemeinsamer Kongreß der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e.V. (BDB) und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e.V. (DGI), Leipzig, 20.-23. März 2000, hrsg. von Georg Ruppelt und Horst Neisser. Wiesbaden: 2000, 301-308.
40. C. Schütte and F. Cordes, *On dynamical transitions between Conformational Ensembles*, Workshop on Molecular Dynamics on Parallel Computers

- ed. by R. Esser, P. Grassberger, J. Grotendorst, and M. Lewerenz, World Scientific, 2000, pp. 32-45.
41. W. Sperber, W. Dalitz, *Portals, Search Engines and Math-Net, nfd Information - Wissenschaft und Praxis*, 51. Jahrgang, Nr. 6, September 2000, 359-263.
 42. M.C. Steinbach, *Hierarchical sparsity in multistage convex stochastic programs*, Stochastic Optimization: Algorithms and Applications (S. Uryasev und P.M. Pardalos, Hrsg.), Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, Lancaster, 2000, S. 363-388.
 43. Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *Electronic structure investigation of the Al_4O_4 molecule*, Chem. Phys. Lett. **324** (2000), 108-114.
 44. T. Steinke, *Tools for Parallel Quantum Chemistry Software*, in: Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, J. Grotendorst (ed.), NIC Series, Vol. 3, Jülich, 2000, p. 67-96.
 45. H. Stüben, *Decorrelation of the topological charge in tempered simulations of full QCD*, in: V. Mitrjushkin and G. Schierholz (eds), Lattice Fermions and Structure of the Vacuum, Kluwer, 2000, 211-218.
 46. G. Powell und M. Weiser, *Views, A New Form of Container Adaptors*, C/C++ Users Journal **44** (2000), 40-51.
 47. M. Weiser und G. Powell, *The View Template Library*, Proceedings of the First Workshop on C++ Template Programming, Erfurt, 2000, online unter <http://oonumerics.org/tmpw00/> erhältlich.
 48. P. Wust, R. Beck J. Berger, H. Föhling, M. Seebaß, W. Wlodarczyk, W. Hoffmann, J. Nadobny, *Electric Field Distributions in a Phased-Array Applicator with 12 Channels - Measurements and Numerical Simulation*, Medical Physics, Vol. 27 (11), pp. 2565-2579, 2000.
 49. Stefan Zachow, Evgueni Gladiline, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, *Finite-Element Simulation of Soft Tissue Deformation*, in H.U. Lemke et al. (eds.) Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS), Elsevier Science B.V., 2000, pp. 23-28.
 50. H. F. Zeilhofer, S. Zachow, J.D. Fairley, R. Sader, P. Deuffhard, *Treatment Planning and Simulation in Craniofacial Surgery with Virtual Reality Techniques*, in J. of Cranio-Maxillofacial Surgery **28** (Suppl 1), 2000, p. 28.
 51. H.F. Zeilhofer, R. Sader, V. Apostolescu, K.H. Hoffmann, M. Göbel, H.-C. Hege, *Die Bedeutung breitbandiger und leistungsfähiger Kommunikationsinfrastrukturen für die kranio-maxillofaziale Chirurgie*, Bildverarbeitung für die Medizin 2000, München, 2000.

52. A. Bley, M. Grötschel und R. Wessäly, *Design of broadband virtual private networks: Model and heuristics for B-WiN*, Robust Communication Networks: Interconnection and Survivability (N. Dean, D. Frank Hsu und R. Ravi, Hrsg.), DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, Band 53, 2000, 1–16.
53. Malte Zöckler, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege, *Fast and Intuitive Generation of Geometric Shape Transitions*, The Visual Computer, Vol. 16, Issue 5, 2000, pp. 241-253.

5.4 Monographien

1. R. Burkard, P. Deuffhard, A. Jameson, G. Strang, J.L. Lions, V. Capasso, H. Engl, J. Periaux (eds.): *Computational Mathematics Driven by Industrial Problems*. Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1739, Springer, Berlin, 2000.
2. K. Gatermann, *Computer Algebra Methods for Equivariant Dynamical Systems*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1728, Springer, Berlin, 2000.
3. J. Lang, *Adaptive Multilevel Solution of Nonlinear Parabolic PDE Systems. Theory, Algorithm, and Applications*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 16, Springer, Berlin, 2000.
4. A. Wagler, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Cuvillier Verlag, Göttingen, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2000.
5. R. Wessäly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Cuvillier Verlag, Göttingen, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2000.

5.5 Habilitationen

Technische Universität Berlin

Christoph Helmberg (Abt. Optimierung)

Semidefinite Programming for Combinatorial Optimization

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.6 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Peter Nettesheim (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Mixed quantum–classical dynamics: a unified approach to mathematical mo-

delling and numerical simulation

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Hermann Stolle (Abt. Optimierung)

Mathematische Modellierung und Lösung von Optimierungsproblemen bei der Planung von Telefonnetzen

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Annegret Wagler (Abt. Optimierung)

Critical Edges in Perfect Graphs

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Roland Wessály (Abt. Optimierung)

Dimension in Survivable Capacitated NETWORKS

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Universität Paderborn

Jörn Gehring (Abt. Computer Science Research)

Entwurf und Implementierung eines verteilten Systems zum Metacomputer-Management

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

5.7 Diplomarbeiten

Freie Universität Berlin

Torsten Albrecht (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Anwendung algebraischer Methoden auf symmetrische Probleme der Robotik

Betreuer: Karin Gatermann (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Bettina Glück (Abt. Optimierung)

Online-Steuerungen automatischer Transportsysteme bei vertretbarer Belastung

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Oleg Mänz (Abt. Optimierung)

Schnittebenenverfahren für das m -cost ATSP

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Nils Meißner (Abt. Optimierung)

Innere-Punkte-Methoden zur Lösung semidefiniter Programme: Vergleich

- verschiedener Suchrichtungen*
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Sven Örgel** (Abt. Optimierung)
Kapazitätserweiterung bei Telekommunikationsnetzwerken: Anwendung von Mixed-Integer-Rounding und verallgemeinerten Flow-Cut-Set-Ungleichungen
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Tobias Pfender** (Abt. Optimierung)
Arboreszenz-Flüsse in Graphen: polyedrische Untersuchungen
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Jan Radonz** (Abt. Optimierung)
Link Restoration with Cut and Branch
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Steffen Weider** (Abt. Optimierung)
Steuerung von Mehrplatz-Aufzügen
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Humboldt-Universität zu Berlin**
- Thomas Röblitz** (Computer Science Research)
Kommunikation in verteilten Systemen mit gemeinsamem Speicher
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)
- Florian Schintke** (Computer Science Research)
Ermittlung von Programmlaufzeiten anhand von Speicherzugriffen, Microbenchmarks und Simulation von Speicherhierarchien
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Produkte

6.1 CodeLib

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von numerischen Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet “Scientific Computing”. Weitere Informationen finden sich auf den Codelib Webseiten unter: <http://www.zib.de/SciSoft/CodeLib/>.

Schwerpunkt der Entwicklungs- und Pflegearbeiten war im Berichtszeitraum die Weiterentwicklung der KARDOS-Software zur Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Aktuelle Informationen finden sich unter: <ftp://ftp.zib.de/pub/elib/codolib>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

6.2 Amira

AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Geometrie-Rekonstruktion und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkern kann 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 sowie eine erweiterbare Entwickler-Version werden auch kommerziell angeboten. Dabei werden die Betriebssysteme IRIX, SUN Solaris, HP-UX, Linux und Windows 9x/NT4/2000 unterstützt.

Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://amira.zib.de>.

Ansprechpartner: Malte Zöckler (zoeckler@zib.de)

6.3 HyperPlan

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

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

Ansprechpartner: Detlev Stalling (stalling@zib.de)

6.4 DOC++

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.

Ansprechpartner: Malte Zöckler (zoeckler@zib.de)

6.5 iTe

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.

Ansprechpartner: Georg Skorobohatyj (skorobohatyj@zib.de)

6.6 VTL

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.

Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://www.zib.de/weiser/vtl/>

Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

6.7 ldasim - Simulator für Speicherhierarchien

`ldasim` ist ein Simulator für Speicherhierarchien zum Berechnen des Einflusses von Speicherzugriffen auf die Ausführungsdauer eines Programms. Der `ldasim` arbeitet nach dem Latency-of-Data-Access (LDA) Kostenmodell, das beliebig viele hierarchische Speicherebenen mit unterschiedlichen Latenzzeiten berücksichtigt. Der Simulator kann für Systeme mit unterschiedlichen Speicherarchitekturen konfiguriert werden und unterstützt auch Mehrprozessorsysteme mit gemeinsamem Speicher (SMP-Systeme) mit verschiedenen Kohärenzprotokollen.

Die Ergebnisse des Simulators können der Optimierung von Speicherhierarchien oder der Optimierung von Programmen dienen. Die Analyse eines Programms erfolgt während dessen Ausführung auf einem von der simulierten Rechnerarchitektur unabhängigen Rechner, nachdem das Programm von Hand instrumentiert wurde.

Der Simulator wurde in C++ implementiert und unter der GNU General Public Licence veröffentlicht.

Eine detaillierte Beschreibung befindet sich im Technischen Bericht ZR-00-33 (<ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications/reports/ZR-00-33.ps>). Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://www.zib.de/schintke/ldasim/>

Ansprechpartner: Florian Schintke (schintke@zib.de)

6.8 dmscp - Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet

Im Zusammenhang mit Sicherheitsproblemen im Internet wird die Nutzung klassischer Dateitransfertools (wie `ftp`) zunehmend erschwert. Das mit der Secure Shell (`ssh`) gekoppelte `scp` ist wegen der Verschlüsselung der Nutzdaten für große Datenmengen ungeeignet. Eine Kompromißlösung ist das ebenfalls auf `ssh` aufsetzende im ZIB entwickelte Produkt `dmscp`. Hier geschieht die Sitzungssteuerung und das Übertragen der Metadaten verschlüsselt und die Nutzdaten werden unverschlüsselt übertragen. Eine Reihe von Maßnahmen verhindert das unbemerkte Verändern der Nutzdaten innerhalb des Netzes.

Zusätzlich hat `dmscp` eine Reihe von Features, die im Zusammenhang mit Data Migration stehen, wie Filefragmentierung und Handeln voller Dateisysteme.

Aufgrund von Optimierung sowohl in der rechnerlokalen Ein-/Ausgabe als auch im Netz ist `dmSCP` bis zu zweimal schneller als `ftp`.

Ein user front end (`yscp`) bietet eine Syntax, die gewohnten Produkten (`rcp/scp`) entspricht.

`dmSCP` wird deutschlandweit vor allem im Hochleistungsbereich und an einigen wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA genutzt.

(siehe auch http://mss.zib.de/mss/dmSCP_paper_20000220.ps). Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://mss.zib.de/mss>

Ansprechpartner: Manfred Stolle (stolle@zib.de)

6.9 Beiträge zu Computeralgebra-Systemen

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.

Folgende Beiträge des ZIB sind Bestandteile von Computeralgebra-Systemen:

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)
REACTION	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. 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.

Ansprechpartner: Winfried Neun (neun@zib.de)

Mathematica

SpecialFunctions W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen, symbolischen Potenzreihen, orthogonalen Polynomen und holonomen speziellen Funktionen.*

Maple

FPS D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.* Es ist ferner Teil der **share** library ab Maple Version V.3.

summation W. Koepf, G. Stöltzing: *Ein Maple Package für die symbolische Summation.* Es ist ferner Teil der **share** library ab Maple Version V.4.

sumtools W. Koepf: *Eine Maple Library für die symbolische Summation.* Die Library ist Teil von Maple Version V.4.

hsum.mpl W. Koepf: *Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities.*

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

Verfügbar: <http://www.zib.de/koepf>

Ansprechpartner: Wolfram Koepf (koepf@zib.de)

moregroebner Version 3.1 (K. Gattermann) Maple V.5-Paket zur Berechnung von Gröbner-Basen von Idealen und Modulen, Hilbert-Reihen.

symmetry Version 3.1 (K. Gattermann, F. Guyard) Maple V.5 Paket zur Berechnung von Invarianten/Äquivarianten für äquivariante Dynamik.

Aktuelle Informationen finden sich unter: <http://www.zib.de/gattermann>

Ansprechpartner: Karin Gattermann (gattermann@zib.de)

6.10 KOBV-Suchmaschine

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 Sy-

steme übernehmen. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig ausgebaut und neue Bibliotheken werden in den Service eingebunden. Diese Dienstleistung stellt die KOBV-Projektgruppe am ZIB bereit.

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

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

6.11 Fremd- und Normdatenserver

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) sowie die Titeldaten der Zeitschriften-datenbank (ZDB). Die Daten werden wöchentlich aktualisiert (Update der Zeitschriften-Titeldaten in Vorbereitung). 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.

Weitere Informationen sind nur einem beschränkten Nutzerkreis zugänglich.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

6.12 KOBV-Informationsserver

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de> wird das zentrale Internet-Informationangebot zum Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) angeboten. Dieser Service wird von der KOBV-Projektgruppe am ZIB bereitgestellt. Weitere Informationen finden sich unter: <http://www.kobv.de>

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

6.13 WWW-Z39.50 Gateway

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. Darüber hinaus 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 ZACK liegt unter: <http://www.biblio.tu-bs.de/zack/> in Braunschweig.

Ansprechpartner: Wolfram Schneider (wosch@infonie.de)

6.14 Math-Net Informationsserver

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. Weitere Informationen finden sich unter: <http://www.math-net.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de), Winfried Neun (neun@zib.de), Wolfram Sperber (sperber@zib.de)

6.15 Informationsdienste des eLib-Servers

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

Der deutsche Spiegel der *Netlib* — zugänglich unter: <http://elib.zib.de/netlib/> — 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 nach elektronisch vorhandenen Ressourcen unter:

<http://www.math-net.de/search/mibb/>.

Die ZIB-Suchmaschine <http://www.zib.de/suche/> zum Auffinden lokaler Dokumente, die über den ZIBIS-Server <http://www.zib.de/> 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-Net¹.

Eine umfangreiche Sammlung von Links auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World*

¹<http://www.math-net.de/>

<http://www.math-net.de/links/> angeboten, die ebenfalls zu den Kernbestandteilen des Math-Net gehören.

Das Opt-Net als elektronisches Forum (<mailto:opt-net-request@zib.de>; Subject: Help) 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)* <http://elib.zib.de/IMU/>, 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)*.

Der ICM'98-Server informiert weiterhin über den *International Congress of Mathematicians* <http://elib.zib.de/ICM98/>, der im Jahre 1998 in Berlin stattfand. Obwohl die Konferenz beendet ist, soll dieser Server zu Demonstrations- und Dokumentationszwecken weiterhin zugänglich bleiben. Zur langfristigen Archivierung existiert bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDG) ein Spiegel <http://webdoc.gwdg.de/ICM98/> des ICM'98-Servers.

Weitere Informationen finden sich unter: <http://elib.zib.de>

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

6.16 GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten

Das System GOS dient zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation im Museum. GOS bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmodulare an, die den komplexen Informationsstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. GOS wird vom ZIB in der Form PC-GOS (für Personal Computer) weitergegeben.

Ansprechpartner: Carlos Saro (saro@zib.de)

Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB–Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Wolfgang Baumann

21.03.2000 *Simulationen im Bereich der Strömungsmechanik (CFD – Computational Fluid Dynamics)*

Besuch des Leistungskurses Mathematik des Karl-Maibach-Gymnasiums Friedrichshafen im ZIB

14.06.2000 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB

21.11.2000 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der TU Berlin im ZIB

Rudolf Beck

27.06.2000 *Algebraic Multigrid for Edge Elements by Component Splitting*

International Workshop on Algebraic Multigrid Methods, Sankt Wolfgang–Strobl, Österreich

Werner Bengner

03.03.2000 *Visions of Numerical Relativity*

Science and Art 2000 – 3rd Int. Conf. on the Interaction of Art and Fluid Mechanics, 28.02.–03.03.2000, ETH Zürich, Schweiz

24.03.2000 *Visual Impressions from Numerical Relativity*

Hauptvortrag mit Videovorführung. Symposium Quantum Field Theory, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Dresden

24.05.2000 *Differentialgleichungen im Universum*

Besuch der AG Differentialgleichungen des Canisius-Kollegs

26.06.2000 *Visual Impressions from Numerical Relativity*

Science Festival 2000, Freiburg i.Br.

15.08.2000 *The Cactus Computational Toolkit*

Seminar, Multiscale Materials Modeling Group, Cornell Theory Center, Cornell University, Ithaca, USA

23.08.2000 *Porting CCTK to Windows2000 on the Cornell Velocity NT Cluster*

Seminar, Multiscale Materials Modeling Group, Cornell Theory Center, Cornell University, Ithaca, USA

18.09.2000 *Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie*

Tagung des Fachausschusses "Computergraphik" der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit R. Kähler u. A. Merzky)

Andreas Bley**12.03.2000** *Capacitated Network Design with Multicast Commodities*

8th International Conference on Telecommunication Systems: Modeling and Analysis, Nashville, USA

09.08.2000 *Network Optimization for IP Traffic*

17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA

17.08.2000 *Design of Survivable IP Networks*

Mathematical Sciences Research Center Seminar, Bell Laboratories, Lucent Technologies, Murray Hill (NJ), USA

12.09.2000 *Capacitated Network Design with Multicast Commodities*

International Conference on Operations Research, Dresden

Ralf Borndörfer**22.06.2000** *Scheduling duties by Adaptive Column Generation*

8th International Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport, Berlin

05.07.2000 *Optimierung im Nahverkehr*

Symposium „Verkehrsforschung und Mobilität“, FAV, Berlin

11.08.2000 *Aggregation techniques for 0/1 programming*

17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA

09.09.2000 *Discrete Relaxations of Combinatorial Programs*

Symposium über Operations Research 2000, Dresden

10.09.2000 *Set Partitioning Optimization Techniques*

Symposium über Operations Research 2000, Dresden

26.09.2000 *Alcuins Transportprobleme*

ZIB, Berlin

27.10.2000 *Dienstplanung und Dienstplanoptimierung in Theorie und Praxis*
13. MICROBUS Treffen, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

08.11.2000 *Discrete relaxations of combinatorial programs*
Kolloquiumsvortrag, Universität Duisburg

Manfred Brandt

21.09.2000 *Asymptotic Results and a Markovian Approximation for the $M(n)/M(n)/s + GI$ System*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), Dresden

Frank Cordes

14.06.2000 *Conformational dynamics of biomolecules*
Poster- Präsentation auf der Tagung "Computational Biophysics", Nizza, Frankreich

29.11.2000 *Creating a Conformation Library*
Konrad-Zuse-Zentrum, Statusseminar mit der AnalytiCon Discovery GmbH

Wolfgang Dalitz

13./14.01.2000 *Unicode - Grundlage für globale Informationssysteme?*
Kick-Off Workshop Carmen, Universität Osnabrück

07.02.2000 *Math-Net: Realization of Math-Net Services – the technical view*
Russian Academy of Science, Center of Scientific Telecommunications and Information Technologies, Moskau, Rußland

29.03.2000 *Multilinguale Informationssysteme, Anforderungen und Möglichkeiten*
IuK 2000: "Information, Knowledge and Knowledge Management", Darmstadt

16.08.2000 *Math-Net - Aktuelle Entwicklungen und Ausblick*
Math-Bib-Net Workshop, Göttingen

19.09.2000 *Math-Net Navigator und Math-Net Page*
DMV-Tagung 2000, Dresden, IuK-Fachgruppe

20.10.2000 *Suche in strukturierten (XML) Dokumenten*
Projekt Carmen, 52. Frankfurter Buchmesse, 22nd International Booksellers' and Librarians' Centre (IBLC 2000), Frankfurt/Main

17.11.2000 *Digital Libraries Projects*
Besuch einer Delegation aus China (Expertengruppe des Kulturministeriums), ZIB, Berlin

Peter Deuffhard

- 27.02.2000** *Progress Towards a Combined MRI/Hyperthermia System*
Invited Talk, High Care 2000, Bochum
- 30.03.2000** *Newton's Method in Function Space and Stiff Initial Value Problems*
Seminar, Mathematics, Universidad de Valladolid, Spanien
- 31.03.2000** *Virtual Patients in Clinical Cancer Therapy Planning*
Invited Talk, Conferencia "Matemática, Ciencia y Sociedad", Medizinische Fakultät, Universidad de Valladolid, Spanien
- 04.04.2000** *From Molecular Dynamics to Conformational Dynamics in Drug Design*
Hauptvortrag: GAMM-Jahrestagung, Göttingen
- 06.04.2000** *From Molecular Dynamics to Conformational Dynamics in Drug Design*
Workshop on Multiscale Computational Methods in Chemistry and Biology, Eilat, Israel
- 24.05.2000** *Differentialgleichungen auf der Titanic*
Vortrag anlässlich des Besuchs der AG Differentialgleichungen des Canisius-Kollegs im ZIB
- 31.05.2000** *Scientific Computation – das neue wissenschaftliche Paradigma*
Eröffnungsvortrag, Paderborn Institute for Scientific Computation (PaS-Co), Universität Paderborn
- 14.06.2000** *From Molecular Dynamics to Conformation Dynamics*
Seminar für Angewandte Mathematik, Universität Genf, Schweiz
- 15.06.2000** *Optimal Therapy Planning at Virtual Cancer Patients*
Fakultätskolloquium, Universität Genf, Schweiz
- 09.10.2000** *Nonlinear Dynamics in Computational Drug Design*
Invited Talk, Tagung Trends in Nonlinear Analysis (TiNA 2000), Heidelberg
- 14.10.2000** *Perspectives of Computational Molecular Dynamics*
3rd International Workshop for Macromolecular Modelling (M^3), Courant Institute, New York University, New York, USA
- 02.11.2000** *Mathematics in Medicine: Cancer Therapy Planning by Virtual Patients*
Invited Talk, Conference "2000 – The Year of Mathematics", Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn
- 07.11.2000** *Genetische Codes: Entschlüsseln, verstehen, verantwortlich nutzen*
Eröffnungsfeier Studiengang Bioinformatik, FU Berlin
- 08.11.2000** *Optimale Therapieplanung am virtuellen Krebspatienten*
Fakultätskolloquium: Fachbereich Mathematik, TU Darmstadt

- 12.–18.11.2000** *Vortragsreihe im Rahmen des DMV–Seminars “Computational Mathematics in Chemical Engineering”*
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach
- 20.11.2000** *Identification of Metastable Dynamical Clusters in Huge Multidimensional Data Sets*
Invited Talk, International Symposium on Data Mining & Statistics, Universität Augsburg
- 11.12.2000** *Adaptive Mehrgitter–Methoden für den Entwurf optischer Wellenleiter*
BMBF–Statusseminar “Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung”, Frankfurt am Main
- 13.12.2000** *Computational Mathematics in Medicine and Biotechnology*
Symposium “The Role of Mathematics in Germany and Japan”, JGCB, Berlin

Andreas Eisenblätter

- 06.03.2000** *Bounding Interference in GSM-networks*
5th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA
- 27.04.2000** *Lower bounds on co-channel interference in GSM-networks by semi-definite programming*
COST 259, Bergen, Norwegen
- 26.07.2000** *Proving Lower Bounds on Interference in GSM-networks*
Frequency Assignment Workshop, Brunel University, England
- 10.08.2000** *Bounding Interference in GSM Cellular Radio Networks by Semidefinite Programming*
17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA

Bodo Erdmann

- 28.06.2000** *Adaptive Linearly Implicit Methods for Instationary Nonlinear Problems*
FEM–3D Jyväskylä, Finnland

Hans-Hermann Frese

- 23.05.2000** *Fortran Programming Models for the Cray T3E*
CUG SUMMIT 2000, Noordwijk, Niederlande

Tobias Galliat

- 26.05.2000** *Self-Organizing Maps Combined with Eigenmode Analysis*
2nd Int. ICSC Symposium on Neural Computation, Berlin
- 12.09.2000** *Data Enrichment of Molecular Structure: Data Mining within Conformational Analysis*
Workshop Knowledge Discovery in Biology, 4th European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases, Lyon, Frankreich
- 20.09.2000** *Clustering Data of Different Information Levels*
IDA 2000, Innsbruck, Österreich

Izaskun Garrido

- 09.08.2000** *Stochastic model predictive control for a distillation column*
17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA
- 08.09.2000** *Mixed finite element models: instability and its consequences*
9th Seminar NUMDIFF on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle.

Karin Gatermann

- 15.01.2000** *Symmetrische Gleichungssysteme in der Robotik*
Humboldt-Universität Berlin, Wissenschaftliche Geburtstagsfeier der Berliner Mathematikerinnen für Sof'ja Kovalevskaja
- 18.01.2000** *Dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie*
Kolloquium der Gruppe Computeralgebra der GMD Bonn
- 08.02.2000** *Mass action kinetics and real algebraic geometry*
Oberseminar *Nichtlineare Dynamik*, FU und WIAS Berlin
- 29.02.2000** *Polynomial Systems arising in Chemistry*
Vortrag im Eisenbud-Seminar, University of California at Berkeley, USA
- 17.03.2000** *Dünnbesetzte polynomielle Gleichungssysteme in der Reaktionskinetik*
Institut für wissenschaftliches Rechnen, Johannes-Kepler Universität Linz, Österreich
- 07.04.2000** *Application of SAGBI bases to dynamics*
Sektion Computeralgebra und -analysis, Jahrestagung der GAMM, 03.–07.04.2000, Göttingen
- 10.04.2000** *Dünnbesetzte polynomielle Gleichungssysteme*
Technische Universität Cottbus

- 15.06.2000** *Sparse polynomial systems in chemical reaction kinetics*
Eingeladener Hauptvortrag auf der AMS-IMS-SIAM Joint Summer Research Conference Symbolic Computation: Solving Equations in Algebra, Geometry and Engineering, 11.–15.06.2000, Mt Holyoke College, Massachusetts, USA
- 18.09.2000** *Dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie*
Übersichtsvortrag in der Sektion Computeralgebra der DMV-Jahrestagung, Dresden, 17.–22.09.2000
- 02.11.2000** *Dünnbesetzte Gleichungssysteme in der Chemie*
Kolloquium Angewandte Mathematik der Universität Hamburg
- 23.11.2000** *Dünnbesetzte polynomielle Gleichungssysteme: Anwendung der Computeralgebra in der Chemie*
Fachbereich Mathematik, Universität Bielefeld
- 08.12.2000** *Dünnbesetzte polynomielle Gleichungssysteme in der Chemie*
Fachbereich Mathematik, Technische Universität München
- 23.10-22.11.2000** *Gastprofessur*
Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg

Ralf Götz

- 06.04.2000** *Statusbericht über den Einsatz der Bandtechnologie T9940A*
Treffen des AK UNICOS im Max-Planck-Institut für Plasmaphysik (IPP)
- 21.09.2000** *Bericht über den Einsatz von ZIB-Modifikationen bzw. Ausfälle der Magnetband Library (STK-9310)*
Treffen des AK UNICOS, TU-Dresden

Martin Grötschel

- 17.01.2000** *Mathematical Aspects of Public Transportation*
Plenarvortrag, Konferenz “Mathematics and the 21st Century”, Kairo, Ägypten
- 28.02.2000** *Vertikale und horizontale Integration wissenschaftlicher Information: Wer setzt die Standards, erhebt die Daten, prüft die Qualität, erhält die Aktualität?*
Global-Info Workshop, BMBF, Bonn
- 29.02.2000** *Math-Net und Didaktik*
Jahrestagung der Gesellschaft für Didaktik der Mathematik, Potsdam
- 09.03.2000** *Matroids and Optimization*
Séminaire du 3^e cycle romand de Recherche Opérationnelle, Lac-Noir, Schweiz

- 09.03.2000** *Stable Sets, Set Partitioning, and Public Transportation*
Séminaire du 3^e cycle romand de Recherche Opérationnelle, Lac-Noir, Schweiz
- 09.03.2000** *Network Design in Telecommunication: Connectivity, Survivability, and Routing*
Séminaire du 3^e cycle romand de Recherche Opérationnelle, Lac-Noir, Schweiz
- 10.03.2000** *Combinatorial Online Optimization*
Séminaire du 3^e cycle romand de Recherche Opérationnelle, Lac-Noir, Schweiz
- 14.03.2000** *MathNet: Infodienste für die Mathematik im Internet*
DFN-Workshop, Berlin
- 17.03.2000** *Nichtlineare Werkzeuge der ganzzahligen Optimierung*
Mathematisches Kolloquium, Universität Tübingen, Tübingen
- 18.03.2000** *Mathematik: eine Schlüsseltechnologie für moderne Telekommunikation*
Tag der Mathematik an der Universität Tübingen, Tübingen
- 28.03.2000** *Math-Net: The Future of Mathematical Information and Communication?*
Conference on “High Performance Scientific Computing”, Hanoi, Vietnam
- 26.04.2000** *Wann ist ein Problem lösbar? Computer und die Grenzen des Rechnens*
Urania, Berlin
- 09.05.2000** *Colouring Mobile Phones*
Konferenz zur Graphentheorie, Elgersburg
- 17.05.2000** *Organizing Large Conferences: Pleasure or Nightmare?*
Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid, Spanien
- 17.05.2000** *Königsberg’s Bridges, Ground States, Cuts, and Binary Matroids*
IMU-Workshop, Madrid, Spanien
- 05.06.2000** *Die Zukunft des wissenschaftlichen Informationswesens*
Universität Frankfurt, Frankfurt a. Main
- 08.06.2000** *Frequenzzuweisung im Mobilfunk*
Universität Kaiserslautern, Kaiserslautern
- 15.06.2000** *$P = NP?$*
Freie Universität Berlin, Berlin
- 26.06.2000** *Math-Net: An Open Archive for Mathematics*
KOBV-Workshop “From Search Engines to Virtual Libraries”, ZIB, Berlin

- 13.07.2000** *The Impact of Mathematical Research on Industry and Vice Versa*
3rd European Congress of Mathematics, Barcelona, Spanien
- 07.08.2000** *The Development of Integer Programming: A Historical View*
Plenarvortrag, 17th International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2000), Atlanta, USA
- 19.09.2000** *Math-Net Internationalisierung: Die ersten Schritte*
DMV-Jahrestagung, Dresden
- 25.09.2000** *Designing Telecommunication Networks: Modelling Issues, Mathematical Problems, and some Solutions*
Network for Computing and Mathematical Modeling, Université de Montréal, Montréal, Canada
- 06.10.2000** *Math-Net International: What do we have, what is to be done?*
CEIC-Meeting, Wien, Österreich
- 17.10.2000** *Mathematik – Schlüsselwissenschaft für Informationstechnik*
Vortrag anlässlich der Eröffnung der Ausstellung “Rechenwunder” im SiemensForum, Berlin
- 04.11.2000** *Mathematics and Computers*
Bolyai Prize Lecture, Ungarische Akademie der Wissenschaften, Budapest, Ungarn
- 09.11.2000** *Mathematik/ Computer/ Perspektiven*
DMV-Veranstaltung anlässlich der “European Science and Technology Week”, ZIB, Berlin
- 10.11.2000** *Elektronisches Publizieren*
BBAW-Internet-Tag, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin
- 14.11.2000** *Quo vadis Bibliotheken?*
Sun Summit Bibliotheken 2000, Berlin
- 17.11.2000** *Discrete Mathematics in Telecommunication*
“International Conference on Mathematics in Industry and the Services”
École Polytechnique, Palaiseau, Frankreich
- 20.11.2000** *Designing Telecommunication Networks: A Challenge for Combinatorial Optimization*
Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, Frankreich
- 05.12.2000** *Nonlinear Techniques in Combinatorial Optimization*
Tagung “The Mathematics of Discrete Tomography”, Oberwolfach
- 06.12.2000** *Zum Einsatz nichtlinearer Methoden in der ganzzahligen Optimierung*
Mathematisches Kolloquium der TU Darmstadt, Darmstadt

- 15.12.2000** *Frequency Assignment in Mobile Phone Systems*
20th Conference on the Foundations of Software Technology and Theoretical Computer Science, Indian Institute of Technology, New Delhi, Indien
- Hans-Christian Hege**
- 15.02.2000** *Schwarze Löcher in Sicht – immersive Überwachung und Steuerung von entfernten Simulationen*
DFN-Symposium “Fortgeschrittene Kommunikationstechnik”, ZIB
- 15.03.2000** *Scientific Visualization – eine Wissenschaft ?*
TU München, Fakultät für Mathematik, AG Angewandte Geometrie & Diskrete Mathematik
- 31.03.2000** *Virtuelle Realität in der MKG-Chirurgie*
Symposium 2000, Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie zu Beginn des 21. Jahrhunderts, Klinikum rechts der Isar, TU München (zusammen mit S. Zachow, R. Sader und H.-F. Zeilhofer)
- 12.04.2000** *Scientific Visualization and Virtual Reality*
IST Workshop on Information Visualisation, European Union, Luxembourg
- 13.04.2000** *Computergestützte Arbeitsumgebungen für biomedizinische Anwendungen*
Universität Kaiserslautern, Fachbereich Informatik, AG Graphische Datenverarbeitung und Computergeometrie
- 04.05.2000** *Aspects of Vector Field Visualization*
Escola Superior Politècnica, Universitat Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien
- 10.05.2000** *Wissenschaftliche Visualisierung und Virtual Reality*
Exkursion von Informatik Studenten der FH Darmstadt, ZIB
- 22.05.2000** *Neue Techniken zur 3D-Bildsegmentierung*
Begutachtung des BMBF-Forschungsverbunds ‘Virtual Brain’, BEO, Projektträger Biologie, Energie, Umwelt des BMBF und des BMWi, Berlin
- 25.05.2000** *Visual Support for Conformational Analysis of Biomolecules*
Dagstuhl-Seminar Scientific Visualization Schloss Dagstuhl, Wadern
- 30.06.2000** *Netzverteilte Chirurgieplanung*
Offizieller Start des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (zusammen mit R. Sader und D. Stalling)
- 14.07.2000** *Entwicklung von Medizinischen Planungssystemen am ZIB*
Technologie-Treffen Prognath, Institut für Physiologie der Ludwig-Maximilians-Universität München
- 11.09.2000** *Landschaftsvisualisierung - Herausforderungen und Fragen*
Workshop „Landschaftsvisualisierung“ des Instituts für Landnutzungssy-

steme und Landschaftsökologie (Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung, Müncheberg) im ZIB

18.09.2000 *Wissenschaftliche Visualisierung: Forschungsziele am ZIB*

Tagung des Fachausschusses "Computergraphik" der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB

Christoph Helmberg

10.01.2000 *A Spectral Bundle Method with Bounds*

Workshop „Kontinuierliche Optimierung und Industrieanwendungen“, Forschungsinstitut Oberwolfach

25.01.2000 *Computational Methods for Solving Semidefinite Relaxations*

Workshop „Linear, Semidefinite Programming and Randomization Methods for Combinatorial Optimization Problems“, Schloss Dagstuhl, Wadern

17.05.2000 *Semidefinite Programmierung*

Universität Duisburg

09.06.2000 *Das Spektrale Bündel-Verfahren*

Universität zu Köln

16.06.2000 *Das Spektrale Bündel-Verfahren zur Lösung großer semidefiniter Programme*

Technische Universität Braunschweig

19.07.2000 *Das Spektrale Bündel-Verfahren*

Technische Universität Berlin

20.08.2000 *Implementational Aspects of the Spectral Bundle Method*

17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA

03.11.2000 *Numerical Evaluation of SBmethod 1.1*

7th DIMACS Implementation Challenge: Semidefinite and Related Optimization Problems, Rutgers, USA

18.12.2000 *Cliquen, Cluster, Eigenwerte*

Universität des Saarlandes

Thorsten Hohage

23.08.2000 *Inverse Medium Scattering Problems: Stability and Numerical Solution.*

WIAS, Berlin

11.12.2000 *Untersuchung von Streuproblemen mit Hilfe der Laplace-Transformation und das PML-Verfahren*

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Göttingen,

Ralf Kähler

- 18.09.2000** *Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie*
 Tagung des Fachauschusses "Computergraphik" der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit W. Benger u. A. Merzky)

Arie M. C. A. Koster

- 10.01.2000** *Frequency Assignment—Models and Algorithms*
 ZIB, Berlin
- 11.02.2000** *The Edge Capacity Polytope & Network Loading Problems—A Polyhedral Analysis*
 ZIB, Berlin
- 07.03.2000** *Lower bounds for Minimum Interference Frequency Assignment*
 Fifth INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA
- 19.06.–21.06.2000** *Forschungsaufenthalt zum Thema „Network Design“*
 Department of Quantitative Economics, Universiteit Maastricht, Niederlande
- 25.07.2000** *The La(te)st Results for the CALMA Minimum Interference Frequency Assignment Problems*
 Frequency Assignment Workshop, Brunel University, Uxbridge (London), Großbritannien
- 09.08.2000** *Network Design Problems – A polyhedral analysis of the Edge Capacity subpolytope*
 17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA
- 04.09.2000** *Lower bounds for CALMA Frequency Assignment Problems*
 2nd Bonn Workshop on Discrete Optimization, Forschungsinstitut für Diskrete Mathematik, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
- 08.09.2000** *Optimization of Optical Networks – a DONET project*
 DONET midterm review meeting, Forschungsinstitut für Diskrete Mathematik, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
- 16.10.–20.10.2000** *Forschungsaufenthalt zum Thema „Treewidth“*
 Institute of Information and Computing Science, Universiteit Utrecht, Niederlande

Sven Krumke

- 19.02.2000** *Online Dial-A-Ride Problems: Minimizing the Makespan*
 17th International Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science, Lille, Frankreich

- 14.04.2000** *Online Dial-A-Ride Problems: Competitive Analysis and Beyond*
Gastvortrag Technical University of Eindhoven, Niederlande
- 01.03.2000** *The Online-TSP against Fair Adversaries*
4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Rom, Italien
- 16.06.2000** *Budget Constrained Minimum Cost Connected Medians*
26th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Konstanz
- 20.06.2000** *Das DAISY Dispositionsassistentensystem: Mathematische Modellierung*
Vortrag beim Allgemeinen Deutschen Automobilclub e.V. (ADAC)
- 08.08.2000** *A New Algorithm for the Network Inhibition Problem*
17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA
- 01.09.2000** *Mehrkriterien-Approximation durch Dekomposition*
Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, RWTH Aachen
- 11.09.2000** *Simulation Studies for Online Problems*
Dagstuhl Seminar „Experimental Algorithms“, Schloß Dagstuhl, International Conference and Research Center for Computer Science

Monika Kuberek

- 27.01.2000** *Der KOBV – Organisatorisches und technisches Verbundmodell*
KMK-Sitzung – AG Bibliotheken im ZIB, Berlin
- 18.04.2000** *Fortschrittsbericht KOBV: Bereitstellung von Normdaten*
13. Tagung des SISIS-Anwenderforums Berlin-Brandenburg, Potsdam
- 08.06.2000** *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg – ein innovatives Konzept*
Vortrag in der Reihe “GAFLID - Gespräche im Vorderhaus” bei der Gesellschaft der AbsolventInnen und FreundInnen des Lehrinstituts für Dokumentation e.V. (GAFLID), Berlin
- 14.07.2000** *The KOBV Project – Organizational and Technical Concept*
Vortrag beim Besuch des litauischen Bibliothekensortiums LINC im ZIB
- 16.09.2000** *Die KOBV-Suchmaschine ein Jahr im Routinebetrieb*
2. Aleph-D-A-CH-Treffen der Aleph-Anwender aus Deutschland, Österreich und der Schweiz am 15./16. September 2000 im ZIB, Berlin
- 10.10.2000** *Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) – Konzept, Erfahrungen, Ausblick*
2. BSZ-Kolloquium des Bibliothekservice-Zentrums Baden-Württemberg am 09./10. Oktober 2000, Konstanz

14.11.2000 *Die KOBV-Suchmaschine – Anfänge und Perspektiven*
Sun Summit 2000 / Die digitale Bibliothek am 14./15. November 2000,
Berlin

Jens Lang

27.01.2000 *Adaptive Linearly Implicit Methods for Nonlinear Parabolic PDE Systems*
CWI, Amsterdam, Niederlande

20.05.2000 *Adaptive Methoden zur effizienten Simulation dynamischer Prozesse*
21. Norddeutsches Kolloquium über Angewandte Analysis und Numerik, TU
Berlin

29.05.2000 *Fehlerkontrollierte Algorithmen in der Dynamischen Prozeßsimulation*
Fachgebiet Theorie Elektromagnetischer Felder, TU Darmstadt

26.06.2000 *Fehlerkontrollierte Rosenbrock-Verfahren für Parabolische Differentialgleichungen*
Fachbereich Mathematik, TU Berlin

29.06.2000 *Adaptive Finite Elemente in Dynamischen Prozesssimulationen*
Fachbereich Mathematik, TU Darmstadt

22.08.2000 *KARDOS Software for Nonlinear Parabolic PDE Systems*
16th IMACS World Congress 2000 on Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation, Lausanne, Schweiz

24.08.2000 *A Two-Dimensional rh -Adaptive FEM Based on a Moving Mesh PDE*
16th IMACS World Congress 2000 on Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation, Lausanne, Schweiz

05.09.2000 *Adaptive Multilevel ROW-Methods for Nonlinear PDAEs*
9th Seminar NUMDIFF on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle/Saale

13.09.2000 *Adaptive Linearly Implicit Methods in Dynamical Process Simulation*
ECCOMAS 2000 on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Barcelona, Spanien

07.11.2000 *VMOL via HMOL: Zuerst Raum oder Zeit?*
Institut für Numerische Mathematik, MLU Halle-Wittenberg

14.11.2000 *KARDOS via VLUGR: Ein Software-Vergleich*
Institut für Numerische Mathematik, MLU Halle-Wittenberg

24.11.2000 *Fehlerkontrolliertes Lösen von partiellen DAEs*
Fachbereich Mathematik, HU Berlin

14.12.2000 *Adaptive Finite Elemente auf bewegten Gittern*
Fachbereich Mathematik, TU Magdeburg

Andreas Löbel

11.09.2000 *Umlaufoptimierung in MICROBUS 2*
MICOBUS Arbeitskreis, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

Stefan Lohrum

14.06.2000 *KOBV - Die Suchmaschine des Kooperativen Bibliotheksverbunds
Berlin-Brandenburg*

14. DFN-Arbeitstagung über Kommunikationsnetze vom 13.-16.06.2000 in
Düsseldorf

27.06.2000 *Definition of the Interface Local System / KOBV Search Engine*
Workshop: "From Search Engines to Virtual Libraries" vom 26.-27.06.2000
im ZIB

19.09.2000 *Using ALEPH Z39.50 in Practice - KOBV Search Engine Experi-
ences*
11. ICAU Annual Meeting vom 18.-20.09.2000 in Berlin

14.11.2000 *Die KOBV-Suchmaschine - Anfänge und Perspektiven*
Sun Summit 2000 / Die digitale Bibliothek am 14./15. November 2000 in
Berlin

30.11.2000 *Anbindung der SISIS-WebOPACS an die KOBV-Suchmaschine*
14. SISIS-Anwenderforum Berlin-Brandenburg in Berlin

Joachim Lügger

18.01.2000 *Die KOBV-Suchmaschine: Realisierung und Leistung für ihre Be-
nutzer*
Veranstaltung des Berliner Arbeitskreises Information (BAK) im ZIB

26.06.2000 *KOBV - Virtual Link and Distributed Catalog Record*
Workshop: "From Search Engines to Virtual Libraries" vom 26.-27.06.2000
im ZIB

27.06.2000 *How to bring a Book into the Web*
Workshop: "From Search Engines to Virtual Libraries" vom 26.-27.06.2000
im ZIB

Frank Lutz

13.01.2000 *Triangulierte Mannigfaltigkeiten mit wenigen Ecken*
ZIB, Berlin

- 15.03.2000** *Beispiele triangulierter Mannigfaltigkeiten*
Workshop „Klassifikation und Erkennung von triangulierten Mannigfaltigkeiten“ des Graduiertenkollegs „Algorithmische Diskrete Mathematik“ und des Europäischen Graduiertenkollegs „Combinatorics, Geometry, and Computation“, FU Berlin
- 16.03.2000** *Konstruktion und Erkennung von Mannigfaltigkeiten: Computer-Demo topologischer Software*
Workshop „Klassifikation und Erkennung von triangulierten Mannigfaltigkeiten“, FU Berlin
- 25.09.2000** *Triangulations of manifolds with few vertices*
Combinatorics Seminar, Department of Mathematics, UC Berkeley, USA
- 29.09.2000** *Triangulated Manifolds with Few Vertices (a computational approach)*
Department of Mathematics, UC Davis, USA
- 06.10.2000** *Triangulated Manifolds with Few Vertices*
Symposium Discrete Mathematics 2000, TU München
- 17.12.2000** *Kristalle und die Verbindung zum Mars: Dichte Kugelpackungen für gute Codes*
Thomastagung der Gesellschaft für Naturkunde in Württemberg, Geologisch-Paläontologisches Institut der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

André Merzky

- 11.04.2000** *High-Performance Computing on German Gigabit WANs*
ISTHMUS 2000 Conference, Poznan, Polen, zusammen mit A. Reinefeld
- 13.04.2000** *Data Description*
1st EGrid Workshop at ISTHMUS 2000, Poznan, Polen
- 01.09.2000** *Data Management WG: Data Managment on the Grid*
2nd EGrid Workshop at Europar 2000, München
- 01.09.2000** *Testbed and Applications WG: European Grid Testbed*
2nd EGrid Workshop at Europar 2000, München
- 18.09.2000** *Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie*
Tagung des Fachausschusses “Computergraphik” der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit W. Benger und R. Kähler)

Michael Meyer

- 29.11.2000** *Virtual Screening of Conformational Libraries*
Konrad-Zuse-Zentrum, Statusseminar mit der AnalytiCon Discovery GmbH

06.04.2000 *Praxisorientied Molecular Modelling*
Fachhochschule Gelsenkirchen

Jacek Nadobny

12.04.2000 *Modular 3-D phased array applicator for regional hyperthermia*
Millennium Conference on Antennas & Propagation, AP 2000, European Space Agency (ESA), Davos, Switzerland

14.07.2000 *Recent research advances of Berlin Hyperthermia Group*
Department of Electrical Engineering, University of Idaho, Moscow, Idaho, USA

18.07.2000 *Development of 3D-phased array applicator for deep body hyperthermia: FDTD modeling and experimental verification*
IEEE Antennas Propagat. Soc. Intern. Symposium, Salt Lake City, Utah, USA

26.07.2000 *Numerical and experimental methods for further development of hyperthermia*
2000 World Congress on Med. Phys. and Biomed. Eng., Chicago, USA

Winfried Neun

29.03.2000 *MathML – der gegenwärtige Zustand aus Nutzerperspektive*
Sitzung der IuK Fachgruppe der DMV, Technische Universität Darmstadt

22.04.2000 *REDUCE 3.7, MathML and OpenMath*
Cathode II Workshop, CIRM, Luminy, Frankreich

Diana Poensgen

09.02.2000 *Corner Polyeder oder Das Gruppenproblem*
ZIB, Berlin

Jörg Rambau

03.01.2000 *Recent Progress on the Generalized Baues Problem*
Workshop „Kombinatorik“, Oberwolfach

01.03.2000 *The Online-Dial-a-Ride Problem under Reasonable Load*
CIAC 2000, Rom, Italien

15.05.2000 *Simulation Studies for the Online-Dial-a-Ride Problem*
Odysseus 2000, Chania, Kreta/Griechenland

11.08.2000 *Online Algorithms for Transportation Problems under Reasonable Load*
17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta,

USA

- 09.–20.10.2000** *Forschungsaufenthalt bei Jesús A. de Loera*
University of California Davis, USA
- 16.10.2000** *Where is the Elevator? The Hard Life of Combinatorial Online Algorithms for Transportation Problems*
Seminar „Optimization“, Davis, USA
- 21.10.2000** *Circuit Admissible Triangulations of Oriented Matroids*
AMS local section meeting, San Francisco, USA

Detlef Reichardt

- 07.06.2000** *Adopting Quantum Chemistry Applications for Metacomputing – Density Functional Calculations with GAMESS-UK*
3rd HLRS Metacomputing Workshop, June 6-7, Stuttgart, (Vortrag mit T. Steinke)

Alexander Reinefeld

- April 2000** *Auf dem Weg zum globalen „Information Power Grid“*
Informatik-Kolloquium, Universität Klagenfurt, Österreich
- April 2000** *High-Performance Computing on German Gigabit WANs*
ISTHMUS 2000, Posen, Polen
- Mai 2000** *HLRN — Die Hochleistungsrechner im Norden*
Arbeitskreis ZKI Supercomputing, Zeuthen
- Juni 2000** *Grid Computing*
Expertentreffen der Europäischen Union, Brüssel, Belgien

Daniel Runge

- 17.01.2000** *Visualisierung im molekularen Kontext*
Seminar: Moleküle im Rechner, Freie Universität Berlin und ZIB (zusammen mit Johannes Schmidt-Ehrenberg)
- 18.09.2000** *Visualisierung molekularer Daten*
Tagung des Fachausschusses “Computergraphik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit Johannes Schmidt-Ehrenberg)

Beate Rusch

- 20.03.2000** *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg - Erste Erfahrungen im Produktionsbetrieb*
90. Deutscher Bibliothekartag im Rahmen des Themenkreises XI: Neue Entwicklungen in den Verbund- und Lokalsystemen, Leipzig

16.09.2000 *Dublettenbehandlung in der KOBV-Suchmaschine*

2. Aleph-D-A-CH-Treffen der Aleph-Anwender aus Deutschland, Österreich und der Schweiz am 15./16.09.2000 im ZIB, Berlin

Carlos Saro**31.10.2000** *Wie lassen sich vorhandene Datenmodelle auf das Conceptual Reference Model der CIDOC (internationaler Arbeitskreis für Dokumentation im Museumsbereich) abbilden? Ein Praxistest.*

Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, ZIB Berlin

Frank Schmidt**11.05.2000** *Diskrete transparente Randbedingungen für die Schrödinger-Gleichung.*

Oberseminar Numerische Mathematik, IWR Heidelberg

11.07.2000 *Discrete Nonreflecting Boundary Conditions for the Helmholtz Equation.*

Fifth International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation – Waves 2000, Santiago de Compostella, Spanien

Johannes Schmidt-Ehrenberg**17.01.2000** *Visualisierung im molekularen Kontext*

Seminar: Moleküle im Rechner, Freie Universität Berlin und ZIB (zusammen mit Daniel Runge)

18.09.2000 *Visualisierung molekularer Daten*

Tagung des Fachausschusses “Computergraphik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit Daniel Runge)

Martin Seebaß**24.05.2000** *Differentialgleichungen in der Krebstherapie*

Besuch der AG Differentialgleichungen des Canisius-Kollegs am ZIB

18.09.2000 *Das Hyperthermie-Planungssystem HyperPlan*

Tagung des Fachausschusses “Computergraphik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) am ZIB

18.12.2000 *Netzwerk-Analyse für den Sigma-60 Applikator*

Treffen der A-Projekte, Sonderforschungsbereich 273, Charité, Campus Virchow-Klinikum, Berlin

Wolfram Sperber

- 13./14.01.2000** *Unicode - Grundlage für globale Informationssysteme?*
Kick-Off Workshop Carmen, Universität Osnabrück
- 07.02.2000** *Math-Net: The concept, the principles, the organization, the state of the art*
Russian Academy of Science, Center of Scientific Telecommunications and Information Technologies, Moscow, Russia
- 27.03.2000** *Discovery and Structuring of Mathematical Resources: Math-Net*
IuK 2000: "Information, Knowledge and Knowledge Management", Darmstadt
- 29.03.2000** *Multilinguale Informationssysteme, Anforderungen und Möglichkeiten*
IuK 2000: "Information, Knowledge and Knowledge Management", Darmstadt
- 19.09.2000** *Math-Net.de - Ausbau der Regionalstruktur*
DMV-Tagung 2000, Dresden, IuK-Fachgruppe
- 05.10.2000** *Math-Net in Germany: The regional concept, technical aspects*
Workshop des Committee on Electronic Information and Communication, Wien, Österreich
- 25.10.2000** *Entwicklungen Im Math-Net*
Herbsttagung der IuK-Initiative, Arbeitskreis Metadaten, Blaubeuren
- 30.10.2000** *Math-Net: Elektronische Informationsdienste aus der Mathematik für die Mathematik*
Abschlußworkshop des Projekts "DissOnline", Berlin
- 17.11.2000** *Digital Libraries Projects*
Besuch einer Delegation aus China (Expertengruppe des Kulturministeriums), ZIB, Berlin
- 20.11.2000** *Math-Net: An Overview*
2. Workshop des Schema Project, Bonn

Detlev Stalling

- 05.05.2000** *Einführung in das Software-System HyperPlan*
1. Treffen des Arbeitskreises HyperPlan, veranstaltet von Dr. Sennewald Medizintechnik GmbH in Berlin
- 18.05.2000** *Amira - An Integrated System for 3D-Data Visualization and Geometry Reconstruction*
European TGS User's Group Meeting, Institut für graphische Datenverarbeitung, Darmstadt

18.09.2000 *3D-Datenvisualisierung mit Amira*

Tagung des Fachausschusses "Computergrafik" der Gesellschaft für Informatik (GI) am ZIB

05.12.2000 *Hyperthermie-Planung am virtuellen Krebspatienten*

VDI-Kolloquium am Institut für Verfahrenstechnik, Universität Hannover

Regine Stein**31.10.2000** *Wie lassen sich vorhandene Datenmodelle auf das Conceptual Reference Model der CIDOC (internationaler Arbeitskreis für Dokumentation im Museumsbereich) abbilden? Ein Praxistest.*

Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, ZIB Berlin

Marc Steinbach**28.01.2000** *Robuste Prozessregelung durch Stochastische Optimierung*

DFG-Workshop „Optimierungsprobleme bei unsicheren Daten“, WIAS, Berlin

21.02.2000 *Hierarchical Sparsity in Multistage Convex Stochastic Programs*

Stochastic Optimization: Algorithms and Applications, Gainesville, Florida, USA

11.05.2000 *Efficient Algorithms for Multistage Stochastic Optimization*

Fast Solution of Discretized Optimization Problems, WIAS, Berlin

20.06.2000 *Tree Recursion in Interior Point Methods for Multistage Stochastic Programs*

University of Cambridge, England

22.06.2000 *Tree Recursion for Multistage Stochastic Programs: Refinement and Applications*

University of Cambridge, England

19.07.2000 *A Stochastic Programming Approach to Robust Model Predictive Control*

European Conference on Operational Research, Budapest, Ungarn

10.08.2000 *Fast Algorithms for Multistage Stochastic Programs in Dynamic Portfolio Management*

International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, Georgia, USA

14.08.2000 *Tree-Sparse Optimization in Process Engineering and Finance*

Rice University, Houston, Texas, USA

Thomas Steinke

- 21.02.2000** *Tools for Parallel Quantum Chemistry Software*
Winterschool "Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry",
Forschungszentrum Jülich
- 07.06.2000** *Adopting Quantum Chemistry Applications for Metacomputing –
Density Functional Calculations with GAMESS-UK*
3rd HLRS Metacomputing Workshop, Stuttgart (Vortrag mit D. Reichardt)
- 16.06.2000** *Quantum Chemical Molecular Calculations on Supercomputers*
Forschungsseminar "Wissenschaftliches Rechnen in den Naturwissenschaften
und der Medizin", Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches
Rechnen (IZWR), Friedrich-Schiller-Universität Jena

Manfred Stolle

- 25.02.2000** *Security Aspects of Bulky Data Transfer via the Internet*
Workshop on Advanced Data Storage / Management Techniques for High
Performance Computing, Daresbury Lab, Warrington, UK
- 01.03.2000** *Anwendung der perl-Datenbank-Schnittstelle*
Kolloquium der Zentraleinrichtung Datenverarbeitung der Freien Univer-
sität Berlin

Hinnerk Stüben

- 17.08.2000** *Hadron masses from dynamical, non-perturbatively $O(a)$ improved
Wilson fermions*
Lattice 2000 — The XVIII International Symposium on Lattice Field Theo-
ry, Bangalore, India

Luis Miguel Torres

- 28.09.2000** *Online Set Partitioning*
ZIB, Berlin
- 02.11.2000** *Online Set Partitioning (2)*
ZIB, Berlin

Annegret Wagler

- 18.02.2000** *Critical Edges in Perfect Graphs*
24. Berliner Algorithmntag, Technische Universität Berlin
- 11.08.2000** *Critical Edges in Perfect Graphs*
17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta,
USA

12.09.2000 *Critically and Anticritically Perfect Graphs*

Optimal Discrete Structures and Algorithms, Universität Rostock

27.11.2000 *Rang-perfekte und schwach rang-perfekte Graphen*

Graduiertenkolleg Diskrete Algorithmische Mathematik, ZIB, Berlin

Martin Weiser**10.10.2000** *The View Template Library*

Workshop on C++ Template Programming, Erfurt

Roland Wessäly**25.01.2000** *Optimierung ausfallsicherer Kommunikationsnetze*

T-Nova, Berlin

08.03.2000 *Integrated Capacity Optimization for Survivable Networks using Path Restoration*

5th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

26.04.2000 *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*

Dissertationsvortrag, Berlin

07.07.2000 DISCNET

TELEKOM AUSTRIA, Wien, Österreich

08.08.2000 *Solving Large-Scale Survivable Network Design Problems*

17th International Symposium on Mathematical Programming, Atlanta, USA

26.09.2000 *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*

First Polish-German Teletraffic Conference, Dresden

09.10.2000 *Optimization in Telecommunications*

Business School, Fribourg, Schweiz

23.11.2000 *Optimierung ausfallsicherer Telekommunikationsnetze*

Alcatel, Stuttgart

Stefan Zachow**31.03.2000** *Virtuelle Realität in der MKG-Chirurgie*

Symposium 2000, Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie zu Beginn des 21. Jahrhunderts, Klinikum rechts der Isar, TU München (zusammen mit H.-C. Hege, R. Sader und H.-F. Zeilhofer)

21.06.2000 *Computer Assisted Cranio-Maxillofacial Surgery*

Fourth IEEE EMBS International Summer School on Biomedical Imaging, Ile de Berder, Bretagne, Frankreich

- 29.06.2000** *Finite-Element Simulation of Soft Tissue Deformation*
Computer Assisted Radiology and Surgery – CARS 2000, San Francisco, USA
- 18.09.2000** *Computergestützte Chirurgie: Forschungsziele am ZIB*
Tagung des Fachausschusses “Computergrafik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) am ZIB

Malte Zöckler

- 22.05.2000** *Amira - Virtuelles Neuroanatomie-Labor*
Begutachtung des BMBF-Forschungsverbunds “Virtual Brain”, BEO, Projektträger Biologie, Energie, Umwelt des BMBF und des BMWi, Berlin
- 18.09.2000** *Visualisierung in der Neuroanatomie*
Tagung des Fachausschusses “Computergraphik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB

Lin Zschiedrich

- 03.02.2000** *Diskrete Transparente Randbedingungen für zeitharmonische Wellengleichungen.*
Diplomanden- und Doktorandenseminar FU Berlin

Adrian Zymolka

- 10.01.2000** *Optimierung optischer Netze*
ZIB, Berlin
- 23.02.2000** *Modellierung optischer Netze*
ZIB, Berlin
- 02.09.2000** *Design optischer Netze*
Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“, RWTH Aachen
- 23.11.2000** *Modellierung optischer Netze*
Alcatel, Stuttgart

7.2 Vorlesungen und Seminare

Wolfgang Baumann: TU Berlin

- WS 99/00** *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, mit F. Thiele)
- 03.–07.04.2000** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (FUB)

und HU, Veranstalter: Wolfgang Baumann, Alexander Reinefeld und Hinnerk Stüben)

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 00 *Funktionentheorie* (Vorlesung/Übung)

Frank Cordes: FU Berlin

SS 00 *Moleküle im Rechner* (Seminar)

Mitveranstalter: C. Schütte, B. Schmidt (FUB)

WS 00/01 *Von der Sequenz zur Struktur von Biomolekülen* (Vorlesung im Studiengang Bioinformatik)

Mitveranstalter: M. Meyer

Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 99/00, SS 00 *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing*
(Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), H. Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), R. März (HU), C. Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

WS 99/00 *Numerik partieller Differentialgleichungen* (Vorlesung)

SS 00 *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen* (Vorlesung)

Karin Gatermann: FU Berlin

WS 99/00 *Verzweigungstheorie* (Vorlesung)

SS 00 *Einführung in die höhere Analysis* (Vorlesung)

WS 00/01 *Computeralgebra* (Vorlesung)

WS 00/01 *Einführung in die Computeralgebra* (Vorlesung an der Universität Hamburg)

Martin Grötschel: TU Berlin

SS 00 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen* (Vorlesung)

WS 00/01 *Lineare Optimierung* (Vorlesung)

Christoph Helmberg: FU Berlin

SS 00 *Ganzzahlige Programmierung* (Vorlesung)

_____ : **TU Berlin**

WS 00/01 *Technische Informatik III* (Vorlesung)

Sven Krumke: TU Berlin

SS 00 *Online Optimierung* (Vorlesung)

WS 00/01 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

Jens Lang: TU Berlin

WS 99/00 *Numerik für Informatiker* (Vorlesung)

_____ : **FU Berlin**

SS 2000 *Theorie und Numerik von Reaktions-Diffusions-Gleichungen* (Vorlesung)

_____ : **Potsdam Institut für Klimafolgenforschung**

SS 2000 *Einführung in die Numerik Partieller Differentialgleichungen* (Seminar)

_____ : **Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg**

Vertretungsprofessor (C4) *für Nichtlineare Gleichungen am Institut für Numerische Mathematik* (vom 09.10. bis 31.12.2000 – Vorlesung)

WS 00/01 *Numerik für Wirtschaftsmathematiker* (Vorlesung)

WS 00/01 *Adaptive Lösung von Parabolischen Differentialgleichungen* (Vorlesung)

WS 00/01 *Numerik für Differentialgleichungen* (Seminar)

Frank Lutz: TU Berlin

WS 99/00 *Höhere Mathematik I für Elektrotechniker* (Übung/Tutorium)

SS 00 *Kombinatorische Mannigfaltigkeiten* (Vorlesung)

SS 00 *(ADM I) Graphen- und Netzwerkalgorithmen* (Übung)

WS 00/01 *(ADM II) Lineare Optimierung* (Übung/Programmierbetreuung)

Jörg Rambau: TU Berlin

WS 99/00 *Ganzzahlige Optimierung* (Seminar; in Zusammenarbeit mit Martin Grötschel und Sven O. Krumke)

SS 00 *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern* (Vorlesung)

WS 00/01 *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

_____ : **Universidad de Cantabria, Santander, Spanien**

SS 00 *Triangulations of point sets and polyhedra* (Sommerschule)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

SS 00 *Cluster Computing mit Linux* (Projektseminar)

Mitveranstalter: Peter Löhr (FU), Torsten Fink (FU), Jens Simon (ZIB)

WS 00/01 *Architektur und Programmierung paralleler Hochleistungsrechner*
(Vorlesung/Übungen) Mitveranstalter: J. Simon (ZIB)

WS 00/01 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Praktikum)
Mitveranstalter: Wolfgang Baumann (ZIB), Hinnerk Stüben (ZIB)

Marc Steinbach: TU Berlin

SS 00 *Numerische Methoden der nichtlinearen Optimierung* (Vorlesung mit
Übungen; in Zusammenarbeit mit Volker Schulz, WIAS)

WS 00/01 *Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse* (DECHEMA-Weiter-
bildungskurs; in Zusammenarbeit mit Günter Wozny und Pu Li, TU Berlin,
und René Henrion, WIAS)

WS 00/01 *Mehrstufige konvexe stochastische Optimierung* (Vorlesung)

Stefan Zachow: TU Berlin

SS 2000 *Computergrafik und VR in der Medizin* (Projektseminar, gemeinsam
mit René Tschirley, Steffen Märkle und Jutta Becker (TU-Berlin))

WS 2000/2001 *Computer Assisted Surgery* (Vorlesung, mit Prof. Dr. Heinz U.
Lemke)

Tagungen und Gäste des ZIB

8.1 Gastvorträge am ZIB

- 10.01.2000** Andreas Gladisch (Deutsche Telekom, T-Nova GmbH):
Entwicklungstrends optischer Netze
- 18.02.2000** Ronald H.W. Hoppe (Universität Augsburg):
Modellierung und Simulation von Bauteilen und Systemen in der Hochleistungselektronik
- 02.03.2000** Taïeb Mellouli (Universität-GH Paderborn):
Netzwerkfluss-basierte mathematische Modelle für Vehicle Maintenance Routing und Crew Scheduling
- 07.03.2000** Mark Proksch (HU Berlin):
Crew Scheduling in der Luftfahrt
- 14.03.2000** Leslaw Bieniasz (Universität Krakau, Polen):
Experiences with the use of adaptive grid approaches to the solution of electrochemical reaction-diffusion PDEs
- 16.03.2000** Lynn Johnson (Engineering Manager HPC Linux):
SGI Linux Strategie und Cluster Management
- 16.03.2000** Sam Watters (Project Leader Resource Management):
SGI Linux Strategie und Cluster Management
- 14.04.2000** Claus Scheiderer (Universität Duisburg):
Beschreibung von Polyedern durch wenige Ungleichungen
- 02.05.2000** Franziska Berger (Universität Jena):
K alternative Wege anstelle K kürzester Wege
- 19.05.2000** Alfred Louis (Universität Saarbrücken):
Effiziente Rekonstruktionsalgorithmen in der 3D Computertomographie und bei einem inversen Streuproblem
- 24.05.2000** Egon Balas (Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA):
Thema: Some Properties of Lift-and-Project Cuts

- 30.05.2000** Robert van de Leensel (Universiteit Maastricht, Niederlande):
A Dynamic Programming Algorithm for the Local Access Network Expansion Problem
- 13.07.2000** Hermann Hellwagner (Universität Klagenfurt, Österreich):
VI Architecture Cluster Communication: Concepts and Performance in the Giganet cLAN
- 14.07.2000** Andrew Stuart (University of Warwick, U.K.):
Derivation of SDE's from Deterministic Evolutions
- 20.07.2000** Alessandro Sarti (UC Berkeley, Department of Mathematics):
Subjective Surfaces: a Geometric Model for Boundary Completion
- 20.07.2000** Claudio Lamberti (Università di Bologna - DEIS):
Maxillo Facial Virtual Surgery from 3D CT Data
- 20.07.2000** Chris Johnson (University of Utah, Salt Lake City):
Scientific Computing and Interactive Visualization
- 21.07.2000** Gerhard Dziuk (Universität Freiburg):
Konvergenz eines in Ort und Zeit diskreten Verfahrens für den anisotropen Mean Curvature Flow
- 24.07.2000** Leszek Demkowicz (University of Texas, Austin, USA):
Parallel hp BE Modeling of the Human Auditory System
- 26.09.2000** Stefan Volkwein (Karl-Franzens-Universität Graz):
Suboptimal control of parabolic systems using proper orthogonal decomposition
- 10.10.2000** Satoru Fujishige (Osaka University, Osaka, Japan):
Polybasic Polyhedra — Structure of Polyhedra with Edge Vectors of Support Size at Most 2
- 27.11.2000** Manfred Padberg (New York University):
Schnittebenenverfahren in der gemischt-ganzzahligen Optimierung
- 04.12.2000** Michael Dellnitz (Universität Paderborn):
Die Identifikation makroskopischer Dynamik
- 04.12.2000** Daniel Hoffmann (Caesar-Institut, Bonn):
High-throughput solution of protein-3D-structures by a combination of chemistry, spectrometry and bioinformatics

8.2 Gastaufenthalte am ZIB

Thorsten Hohage (damals Universität Linz)
10.01.2000

- Andreas Gladisch** (Deutsche Telekom, T-Nova GmbH, Berlin)
10.01.00
- Taieb Mellouli** (Universität Paderborn)
01.03.–02.03.2000
- Edgar Gabriel** (Rechenzentrum, Universität Stuttgart)
08.–09.03.2000
- Matthias Müller** (Rechenzentrum, Universität Stuttgart)
08.03.–09.03.2000
- Torres Carvajal, Luis Miguel** (Quito, Ekuador)
01.04.–31.12.2000 — Promotionsstipendium vom DAAD
- Claus Scheiderer** (Universität Duisburg)
14.04.00
- Thomas Wolf** (Queen Mary and Westfield College, London, und ZIB-Fellow)
17.–20.04.2000 und 14.–18.08.2000
- Franziska Berger** (Universität Jena)
02.05.2000
- Anthony Hearn** (RAND, Santa Monica, USA)
06.05.–13.05.2000
- Egon Balas** (Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA)
24.05.2000
- Christopher Johnson** (University of Utah, Salt Lake City, USA)
29.05.–02.06.2000
- Alfred Louis** (Lehrstuhl für Angewandte Mathematik Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
18.05.–23.05.2000
- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques EPFL, Lausanne)
20.05.–23.05.2000
- Wolfram Büttner** (ZFE BT SE 14, Siemens AG, München)
20.05.–23.05.2000
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Abt. Festnetzplanung, Düsseldorf)
21.05.–23.05.2000
- Joachim Römelt** (Bayer AG, Leverkusen)
22.05.–23.05.2000
- Manfred Schreier** (Ingenieurwissenschaften (BVT/RT), Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg)
30.05.2000

- Robert van de Leensel** (Universiteit Maastricht, Niederlande)
29.–31.05.2000
- Florian Potra** (Department of Mathematics and Statistics University of Maryland, Baltimore County)
16.06.–31.07.2000
- Gregor von Laszewski** (Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, Illinois, USA)
20.06.–21.06.2000
- Valentin Christea** (Control Systems and Computer Science Faculty, Politehnica University of Bukarest)
06.07.2000
- Hermann Hellwagner** (Institut für Informationstechnologie, Universität Klagenfurt, Österreich)
13.07.–16.07.2000
- Stefan Volkwein** (Karl-Franzens-Universität Graz)
22.09.–29.09.2000
- Satoru Fujishige** (Osaka University, Japan)
10.10.–12.10.2000
- Francesco Ortega** (CORE, Louvain-la-Neuve, Belgien)
30.11.–03.12.2000
- Manfred Padberg** (New York University, USA)
26.11.–30.11.00
- Laurence Wolsey** (CORE, Louvain-la-Neuve, Belgien)
30.11.–02.12.2000
- Fritz Colonius** (Institut für Mathematik, Universität Augsburg)
04.12.–06.12.2000
- Tobias Gayer** (Institut für Mathematik, Universität Augsburg)
04.12.–06.12.2000
- László Szegő** (Eötvös Lorand Universität, Budapest, Ungarn)
04.12.–22.12.2000
- German Cancio** (IT/PDP, CERN, Genf, Schweiz)
20.12.2000

8.3 Tagungen und Veranstaltungen des ZIB

14.01.2000 EGrid PC-Meeting

Veranstalter: Christian Hege, André Merzky, Alexander Reinefeld, Hinnerk Stüben

- 14.–15.02.2000** DFN-Symposium „Fortgeschrittene Kommunikationstechnik“
- 21.03.2000** Besuch des Leistungskurses Mathematik des Karl-Maibach-Gymnasiums Friedrichshafen (Baden-Württemberg)
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Britta Broser, Frank Cordes, Ralf Götz, Wilhelm Huisinga
- 05.–06.05.2000** Konstituierendes Treffen des Arbeitskreises HyperPlan, gemeinsam veranstaltet mit der Firma Dr. Sennwald Medizintechnik GmbH (München). Einführung in das Planungssystem HyperPlan für Anwender aus Berlin, München und Graz. Veranstalter: M. Seebaß, D. Stalling, N. Westerhoff, M. Zöckler.
- 24.05.2000** Besuch im ZIB: AG Differentialgleichungen, Canisius-Kolleg, Berlin-Tiergarten. Veranstalter: Peter Deuffhard
- 14.06.2000** Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 16.06.2000** Informationsnachmittag für Studenten: Projekte für studentische Hilfskräfte am ZIB
Veranstalter: Martin Grötschel, Frank Lutz
- 26.–27.06.2000** KOBV Workshop: From Search Engines to Virtual Libraries
Veranstalter: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch
- 30.06.2000** Offizieller Start des G-WiN
Veranstalter: DFN-Verein unter Mitwirkung des ZIB
- 06.09.2000** Technologie Update (Fa. CISCO Systems GmbH und die BRAIN Planungsgruppe)
Veranstalter: Hubert Busch, Renate Weidinger
- 11.09.2000** Workshop „Spezifikation eines 3D-Visualisierungstools für die Landschaftsplanung“, gemeinsam veranstaltet mit dem Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF), Müncheberg
- 15.–16.09.2000** Aleph-D-A-C-H-Tagung
Treffen der deutschsprachigen Aleph-Anwender im ZIB
Mitveranstalter: Martin Grötschel, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Beate Rusch
- 16.10.2000** Besuch der AG Martin Vingron (MPI-MG Berlin, DKFZ Heidelberg) am ZIB
Veranstalter: Thomas Steinke, Frank Cordes, Tobias Galliat, Michael Meyer, Daniel Runge, Johannes Schmidt-Ehrenberg
- 30.10.–1.11.2000** Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund

Veranstaltung in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde. Programm und Kurzbericht unter <http://www.museumsbund.de>.

21.11.2000 Besuch von Studenten der TU Berlin im ZIB

Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz

8.4 Mitveranstalter von Tagungen

Peter Deuflhard

05.–08.03.2000 *DANSE Workshop “Transfer Operators: Theory and Applications”*, Universität Paderborn (gemeinsam mit Ch. Schütte)

08.–11.10.2000 *Third International Workshop on Methods of Macromolecular Modelling (M^3)*, Courant Institute, New York University, NY, USA (gemeinsam mit J. Hermans, B. Leimkuhler, A.E. Mark, S. Reich, T. Schlick, R. Skeel, Hin Hark Gan)

12.–18.11.2000 *DMV-Seminar “Computational Mathematics in Chemical Engineering and Biotechnology”*, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach (gemeinsam mit R. Klein, Ch. Schütte)

Hans-Hermann Frese

22.–26.05.2000 *CUG SUMMIT 2000*, Noordwijk, Niederlande

Martin Grötschel

03.07.2000 *Euler-Vorlesung*, Potsdam

10.11.2000 *Workshop der BBAW: Elektronisches Publizieren*, Berlin

Frank Lutz

13.–17.03.2000 *Workshop „Klassifikation und Erkennung von triangulierten Mannigfaltigkeiten“ des Graduiertenkollegs „Algorithmische Diskrete Mathematik“ und des Europäischen Graduiertenkollegs „Combinatorics, Geometry, and Computation“*, FU Berlin

Alexander Reinefeld

11.–13.04.2000 *1st European Grid Forum*, Posen, Polen

28.06.2000 *IWIC: International Workshop on Internet Computing at PDPTA*, Las Vegas, USA

26.–29.06.2000 *CIC'2000, International Conference on Communications in Computing*, Las Vegas, USA

- 29.08.–01.09.2000** *Metacomputing-Workshops der Europar 2000*, München
- 29.–30.08.2000** *SCI-Europe 2000 3rd International Conference on SCI-based Technology and Research*, München
- 28.11.–02.12.2000** *Cluster 2000: IEEE International Conference on Cluster Computing*, Chemnitz
- 17.–20.12.2000** *Grid 2000: IEEE Int. Workshop on Grid Computing*, Bangalore, India

8.5 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 27.01.2000** KMK-Sitzung – AG Bibliotheken im ZIB:
Präsentation: Die KOBV-Suchmaschine – Prinzipien und Implementierung; Beate Rusch
- 24.02.–01.03.2000** CeBit Hannover, Stand des Forschungsmarkt Berlin:
Strukturanalyse von Biomolekülen (F. Cordes, A. Fischer, W. Huisinga, M. Meyer, D. Runge, J. Schmidt-Ehrenberg)
- 24.02.–01.03.2000** CeBit Hannover, DFN-Stand:
Schwarze Löcher kollidieren. TIKSL – Visuelle Kontrolle und Steuerung von entfernten Simulationen (A. Merzky, W. Benger, H.C. Hege)
- 24.02.–01.03.2000** CeBit Hannover, Stand der Firma Hewlett-Packard (in Kooperation mit Indeed – Visual Concepts und TGS):
Präsentation der Software Amira
- 20.–23.03.2000** Bibliothekskongreß “Information und Öffentlichkeit” in Leipzig:
Demonstration der KOBV-Suchmaschine: Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Beate Rusch
- 09.04.–12.04.2000** Workshop „Design of Reliable Communication Networks DRCN2000“, München:
Präsentation des Netzwerk-Dimensionierungstools IP-DESIGNER
- 15.04.–29.10.2000** 7 Hügel — Bilder und Zeichen des 21. Jahrhunderts:
Visualisierungen zur allgemeinen Relativitätstheorie H.C. Hege, W. Benger
- 08.–14.06.2000** Mannheim Supercomputing:
Distributed Applications for Molecular Simulations in Chemistry – UNICHEM; Thomas Steinke
- 13.–17.06.2000** Science Fair Berlin 2000:
Strukturanalyse von Biomolekülen (T. Baumeister, F. Cordes, P. Deuffhard, M. Meyer, U. Nowak, O. Paetsch, R. Roitzsch, D. Runge, J. Schmidt-Ehrenberg)

- 24.06.2000** Tag der offenen Tür, Charité, Campus Virchow-Klinikum, Berlin:
Vorführung des Planungssystems HyperPlan (M. Seebaß)
- 30.06.2000** Offizieller Start des Gigabit-Wissenschaftsnetzes des DFN:
„Schwarze Löcher kollidieren lassen“ – Präsentationen zu Numerischer Astrophysik und rechnergestütztem Medikamenten-Entwurf sowie zu Chirurgieplanung (P. Deuffhard, Abt. Wissenschaftliche Visualisierung, Ed Seidel, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Potsdam-Golm, Robert Sader, Klinikum rechts der Isar der TU München)
- 14.07.2000** Besuch des litauischen Bibliothekenkonsortiums LINC im ZIB:
Präsentation: The KOBV Search Engine - Its Principles and Implementation; Beate Rusch
- 25.–28.08.2000** SIGGRAPH 2000, New Orleans, Louisiana, USA (in Kooperation mit Indeed – Visual Concepts und TGS):
Präsentation der Software Amira
- 18.–21.07.2000** The Internet Global Summit, The 10th Annual Internet Society Conference, Yokohama, Japan:
Online Monitoring and Steering of Remote Black Hole Simulation (W. Benger, A. Merzky)
- 01.–04.08.2000** Ninth International Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC-9), Pittsburgh, Pennsylvania, USA:
Cactus - Remote Streaming, Remote Steering (W. Benger)
- 22.–25.08.2000** MEDICA 2000, 32. Internationale Fachmesse mit Kongress, Düsseldorf (in Kooperation mit Indeed – Visual Concepts und TGS):
Präsentation der Software Amira
- 04.–09.11.2000** Neuroscience 2000, New Orleans, Louisiana, USA (in Kooperation mit Indeed – Visual Concepts und TGS):
Präsentation der Software Amira
- 14.–15.11.2000** Sun Summit 2000 / Die digitale Bibliothek in Berlin:
Demonstration der KOBV-Suchmaschine: Monika Kuberek, Stefan Lohrum
- 17.11.2000** Besuch einer Expertengruppe des chinesischen Kultusministeriums Peking im ZIB:
Präsentation: The KOBV Search Engine - Its Principles and Implementation; Beate Rusch

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 2000 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Gerhard Braun, FUB
- Prof. Dr. Elmar Kulke, HU, stellv. Vorsitzender — bis 31.08.2000
Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel — seit 01.09.2000
- StS Prof. Dr. Ingolf Hertel, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — bis 17.01.2000
StS Dr. Josef Lange, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — ab 18.01.2000
- 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 18. September 2000.

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 //www.zib.de/org/satzung/index.de.html.

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, Schweiz
Prof. Dr. Hanns–Jürgen Lichtfuß	– Technologiestiftung Berlin, Berlin
Prof. Dr. Alfred Louis	– Universität des Saarlandes, Saarbrücken Sprecher des Beirates
Dr. Joachim Römelt	– Bayer AG, Leverkusen
Prof. Dr. Karl–Victor von Schöning	– Inpro GmbH, Berlin
Dr. Horst D. Simon	– NERSC, Lawrence Berkeley Na- tional Laboratory, Berkeley, USA — seit 25.01.2001
Dr.–Ing. Erhard Winter	– E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 22./23. Mai 2000 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group
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 2000 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 2000 wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)
 Wolfgang Dalitz
 Klaus-Dietrich Engel — vom 03.10.2000 — 22.11.2000
 Marlies Engelke — seit 23.11.2000
 Bodo Erdmann
 Klaus Jacobsen — seit 23.11.2000
 Gabriele Kempf
 Dirk Krickel — seit 23.11.2000
 Wolfgang Maibauer — verstorben am 02.10.2000

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die bekannten finanziellen Schwierigkeiten der öffentlichen Hand und der industriellen Kooperationspartner geprägt — ein Zustand, der ab 2001 die Substanz des ZIB zu beeinträchtigen droht. Die kontinuierlichen Kürzungen des Zuschusses durch den Senat von Berlin mußten im Berichtsjahr 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. Probleme bei der Planung für den Höchstleistungsrechner Nord (HLRN) führten dazu, daß die hierfür veranschlagten Mittel weitgehend in Folgejahre verschoben werden mußten. Die bisherigen Festlegungen lassen die begründete Hoffnung zu, den HLRN-Rechner als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 40 Millionen DM in den Jahren 2001 bis 2003 endlich zu realisieren.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2000 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 23.980 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 19.330 TDM und auf Investitionen 4.650 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuß von 14.440 TDM. Die eigenen Erträge, insbesondere aus Kooperationen und Drittmittelprojekten, waren mit 4.605 TDM veranschlagt; ungeachtet einer äußerst erfreulichen Steigerung der Drittmiteleinahmen auf 7.368 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 nachstehenden Tabelle (Jahresabschlußrelevante Angaben) ablesen.

Einnahmen in den Jahren 1993 — 2000 (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 ²	800	237	21.312
1998	1.680	3.766	14.835	850	99	21.230
1999	2.108	3.409	14.848 ³	4.330	192	24.890
2000 ⁴	3.561	3.780	14.440	3.050	268	25.099

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (77,5 Stellen, — 4 Beamten- und 73,5 Angestelltenstellen — davon 2 Stellen ohne Bezüge und 4,5 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 Fi-

²Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

³Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

⁴voraussichtliches Ist 2000 – vor Prüfung durch den Wirtschaftsprüfer

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:

	01.01.2000	01.01.2001
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	75	78
Datenverarbeitung/Technik	28	24
Verwaltung/Bibliothek	17	16
Studentische Hilfskräfte	31	41
Insgesamt	155	163

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2001 insgesamt 98 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 63 Beschäftigte finanziert.

KAPITEL 10

Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard
Inhaber des Lehrstuhls
Scientific Computing am Fachbereich
Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
Inhaber des Lehrstuhls
Diskrete Mathematik am Fachbereich
Mathematik der Technischen Universität Berlin
Tel. (030) 841 85 – 210

Bereichsleiter Prof. Dr. Alexander Reinefeld
Computer Science: Hochschullehrer am Fachbereich Informatik
der Humboldt–Universität zu Berlin
Tel. (030) 841 85 – 130

Bereichsleiter Henry Thieme
Verwaltung: Tel. (030) 841 85 – 100

Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard	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 Research:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	841 85–130
Höchstleistungsrechner:	Hubert Busch	841 85–135
Interne Rechenzentrumsdienste:	Wolfgang Pyszkalski	841 85–152
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