

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7
D-14195 Berlin-Dahlem
Germany

Jahresbericht 2001



VORWORT

Wie in den vergangenen Jahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz *Zuse-Institut Berlin (ZIB)*, auch nach Ablauf des Jahres 2001 seinen Freunden und Gönnern sowie allen Interessenten aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Jahresbericht vor – für Außenstehende als Rechenschaftsbericht, für uns selbst als Bestandsaufnahme.

Kurz vor Abfassung dieses Berichtes verstarb der Präsident der TU und langjährige Vorsitzende unseres Verwaltungsrates, **Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers**. Wir haben ihm alle viel zu verdanken. Unseren ZIB-Belangen stand er stets aufmerksam, entscheidungsfreudig und kritisch wohlwollend gegenüber. Ganz sicher werden wir ihm lange ein persönliches gutes Angedenken bewahren.

Erfreuliches ist zu berichten von zwei Verbundvorhaben, bei denen sich Berlin gegenüber starker Konkurrenz fachlich und, nicht zuletzt, auch fachpolitisch durchsetzen konnte. In beiden Fällen hat sich das ZIB nicht nur institutionell, sondern auch personell intensiv engagiert.

- Seit 1. Juli 2001 wird vom BMBF das neue *Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB)* gefördert; dieses Centrum stützt sich auf die beiden Universitäten FU und HU sowie die außeruniversitären Forschungsinstitute Max-Delbrück-Centrum (MDC), MPI für Molekulare Genetik und ZIB; Sprecher ist Martin Vingron (MPIMG), Peter Deuffhard ist einer der vier Initiatoren. Die Laufzeit beträgt fünf Jahre.
- Das Jahr 2001 war geprägt durch den (zweiten) Vorantrag und schließlich den umfangreichen Antrag für ein DFG-Forschungszentrum *Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse*. Die Begutachtung war Ende Januar 2002 erfolgreich, die Bewilligung erfolgte schließlich zum 1. Juni 2002. Getragen wird dieses Zentrum von den drei Berliner Universitäten TU, FU und HU sowie von zwei außeruniversitären Forschungsinstituten, dem Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS) und dem ZIB; Sprecheruniversität ist die TU, wo das Zentrum auch angesiedelt sein wird. Die entsprechende Entscheidung der TU im Vorfeld geht auf das persönliche Engagement und die Risikobereitschaft des inzwischen verstorbenen Präsidenten Ewers zurück; Martin Grötschel, der zugleich Mitglied der TU ist, wird Koordinator des Zentrums, Peter Deuffhard ist einer der fünf Initiatoren. Die Laufzeit ist zunächst vier Jahre mit einer Option auf maximal zwölf Jahre. Gefördert werden ca. 70 Wissenschaftlerstellen in Berlin, darunter

6 neue Professuren an den drei Universitäten. Diese Bewerbung hat wesentliche Kräfte des ZIB im Berichtszeitraum gebunden – weshalb an dieser Stelle auch der zeitliche Vorgriff erlaubt sei.

Seit Beginn 2001 ist die Zentrale des KOBV (Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg) am ZIB angesiedelt und trägt somit dem Charakter als integrierte Service- und zugleich Entwicklungsaufgabe Rechnung. Diese Konstruktion soll Ende 2003 auf ihre Tragfähigkeit überprüft werden.

Mit der Auswahl eines gekoppelten Hochleistungsrechnersystems für die Standorte Berlin (ZIB) und Hannover (RRZN) ist der *Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)* einen entscheidenden Schritt vorangekommen. Nach einem sorgfältigen Auswahlverfahren erfolgte die Vergabe an die Firma IBM. Mit einer Spitzenleistung von 4 TeraFlop/s liefert das neue System etwa die achtfache Leistung unserer jetzigen Cray T3E.

Natürlich waren wir als ZIB auch im Berichtszeitraum wiederum wissenschaftlich aktiv. Das besonders hohe *Drittmittleinkommen* des Vorjahres konnten wir zwar nicht ganz halten, haben aber immerhin auch 2001 beachtliche Einnahmen erzielt. Inzwischen werden knapp 70 Mitarbeiter aus Drittmitteln finanziert. Aus fachlicher Innensicht konnten wir unsere *Forschungsaktivitäten* in unseren Schwerpunktsgebieten weiterhin erfolgreich ausbauen, wovon dieser Bericht im Detail ausführlich Zeugnis ablegt. Ein weiterer Indikator unseres wissenschaftlichen Standings sind *Rufe* und *Auszeichnungen* an Mitglieder des ZIB. Zunächst freue ich mich mitteilen zu können, daß Alexander Reinefeld den Ruf auf eine C4-Professur für Praktische Informatik mit Schwerpunkt Parallele und verteilte Systeme an der HU erhalten und angenommen hat und somit dem ZIB als Leiter des Bereiches Computer Science erhalten bleiben kann. Weitere Rufe, die allerdings mit dem Weggang der betreffenden Kollegen und Kolleginnen verbunden sind, gingen im Berichtszeitraum an Jens Lang (C4, TU Darmstadt), Christoph Helmberg (C3, Universität Kaiserslautern) und Cornelia Kober (C2, FH Kaiserslautern sowie FH Osnabrück). Roland Wessälly erhielt den Mannesmann-Innovationspreis, Peter Deuffhard wurde in die Berlin-Brandenburgische Akademie gewählt. Die vom ZIB organisierte erste EMS-SIAM-Tagung *Applied Mathematics in our Changing World* zog ca. 500 Teilnehmer an und erwies sich als großer Erfolg; Initiator, Co-chair und Sprecher des Program Committee war Peter Deuffhard, einer der Invited Speakers aus einer hochkarätig besetzten Reihe war Martin Grötschel.

Der *Wissenschaftliche Beirat* des ZIB tagte am 25./26. Juni 2001 und hat sich diesmal sehr intensiv mit den Perspektiven des ZIB in der sich rasch wandelnden Berliner Landschaft beschäftigt. Aus dem Fazit seines Berichts zitieren wir gerne die Aussagen: “Das ZIB hat in den von ihm vertretenen Bereichen seine international führende Stellung ausgebaut. Es ist ein Glanzpunkt Berliner Innovation.”

Die Berliner Politik ist seit Ende 2001, für jedermann sichtbar, stark in Bewegung geraten: wir werden sehen, wie die neuen Verantwortlichen mit der Rolle des ZIB als "Botschafter Berlins" (Zitat aus dem Bericht des Wissenschaftlichen Beirats) umgehen.

Berlin, im Mai 2002

A handwritten signature in black ink that reads "Peter Deuffhard". The script is cursive and somewhat stylized, with the first letter 'P' being particularly large and prominent.

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



Das Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin-Dahlem

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Das ZIB — Struktur und Ziele	9
2	Forschung und Entwicklung	14
2.1	Überblick	14
2.2	Schwerpunkte	24
2.2.1	Molekulare Konformationsdynamik	24
2.2.2	Integrierte Optik	29
2.2.3	Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle	35
2.2.4	Computergestützte Therapieplanung	43
2.2.5	Biomedizinische Bildverarbeitung	51
2.2.6	Virtuelle Labors	58
2.2.7	Nichtlineare Optimierung und Steuerung	72
2.2.8	Ganzzahlige Optimierung	81
2.2.9	Diskrete Strukturen	86
2.2.10	Telekommunikation	95
2.2.11	Online-Optimierung	106
2.2.12	Verkehr	114
2.2.13	Grid Computing	120
2.2.14	Cluster und Systemnetzwerke	123
2.3	Auszeichnungen und Rufe	125
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	126
3.1	Überblick	126
3.2	Schwerpunkte	128
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	128
3.2.2	Math-Net - ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik	132
3.2.3	Math&Industry - Anwendungen der Mathematik im Web . . .	133

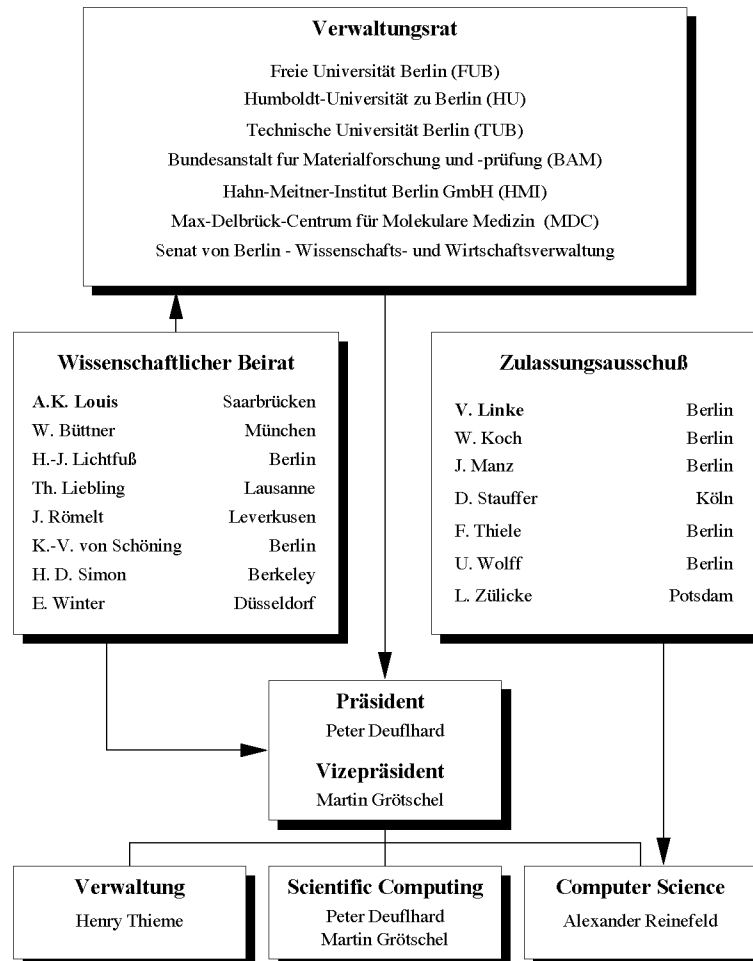
3.2.4	CARMEN: Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten	134
3.2.5	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	135
3.2.6	REDUCE	137
4	Supercomputing und Netze	139
4.1	Berliner Hochleistungsrechner	139
4.1.1	Systemkonfiguration und Software-Ausstattung	139
4.1.2	System- und Netzsicherheit	141
4.1.3	Zulassungsausschuß und ausgewählte Großprojekte	142
4.2	Norddeutscher Hochleistungsrechner (HLRN-Verbund)	153
4.3	Fachberatung	154
4.3.1	Chemie und Bioinformatik	155
4.3.2	Geowissenschaften	156
4.3.3	Ingenieurwissenschaften	157
4.3.4	Physik	158
4.4	Projekte im Bereich Weitverkehrsnetze	158
4.4.1	Berliner-Wissenschaftsnetz BRAIN	158
4.4.2	Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) des DFN	160
4.4.3	Classical BRAIN	161
4.4.4	Koordinierung der Berliner Gigabit-Testbed-Projekte	163
5	Publikationen	164
5.1	Preprints	164
5.2	Mitherausgabe von Publikationen	178
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden	179
5.4	Monographien	185
5.5	Dissertationen	185
5.6	Diplomarbeiten	186
6	Produkte	188
6.1	CodeLib	188
6.2	Amira	188
6.3	HyperPlan	189
6.4	DOC++	189

6.5	iTe	189
6.6	VTL	189
6.7	Verfahren aus der Computeralgebra	190
6.8	Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale	192
6.9	Math-Net Informationsserver	194
6.10	Informationsdienste des eLib-Servers	194
6.11	GOS – Datenbank für kulturgeschichtliche Daten	195
6.12	SoPlex	196
6.13	MCF	196
6.14	TOPCOM	196
6.15	Idasim - Simulator für Speicherhierarchien	197
6.16	dmscp - Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet	197
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	199
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	199
7.2	Vorlesungen und Seminare	218
7.3	Mitveranstalter auswärtiger Tagungen	221
8	Tagungen und Gäste am ZIB	223
8.1	Gastvorträge	223
8.2	Gastaufenthalte	224
8.3	Tagungen und Veranstaltungen	226
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	227
8.5	Mathematik in die Schule	228
9	Organisatorisches	230
9.1	Organe	230
9.2	Satzung	231
9.3	Wissenschaftlicher Beirat	231
9.4	Mitgliedschaften	231
9.5	ZIB-Fellows	232
9.6	Selbstverwaltung	232
9.7	Wirtschaftliche Situation	233
9.8	Personelle Entwicklung	235

10 Ansprechpartner**237**

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

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

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

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

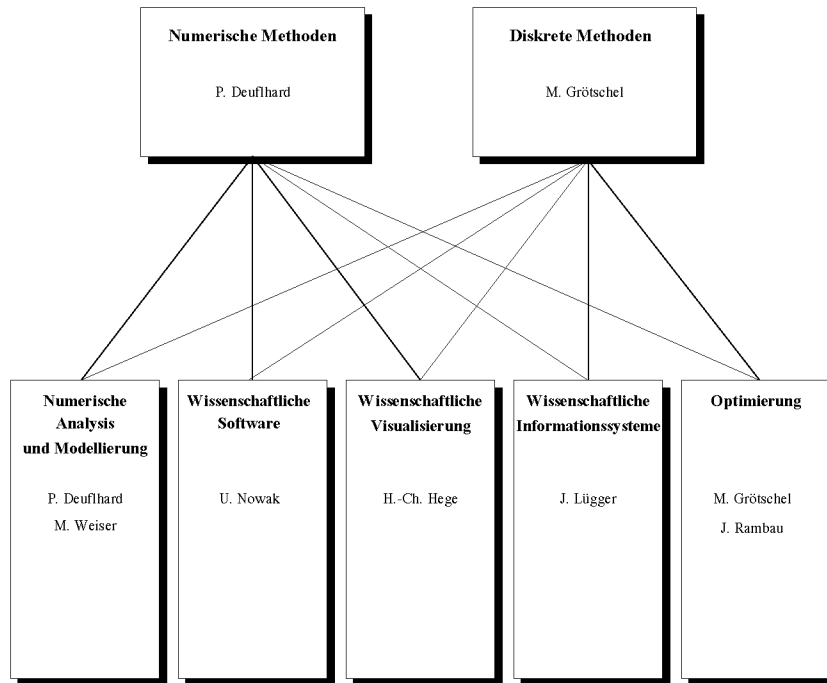
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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

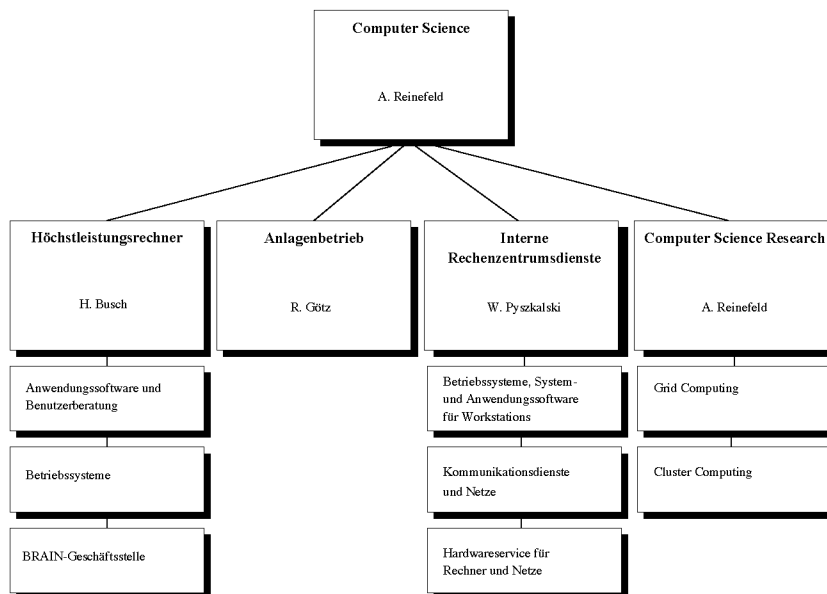
Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer; die derzeit installierten Systeme des Herstellers SGI/CRAY werden künftig durch IBM-Rechner abgelöst) als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen im Land Berlin. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus 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, Integrierte Optik und Medizintechnik.

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. Eine zusätzliche Orientierung in Richtung Neurobiologie und Medizintechnik läuft an. Die Abteilung betreut die Programmbibliothek CodeLib und berät deren Nutzer. Vorwiegend für Ausbildungszwecke gedacht ist die Entwicklung interaktiver WWW-Labors für numerische Software.

Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung. Aufgabe ist die Entwicklung und Implementierung von neuen Verfahren in den Bereichen wissenschaftliche Visualisierung und biomedizinische Bildverarbeitung. 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 sowie nichtlineare-, stochastische- und Online-Optimierung. Dabei steht die Untersuchung praxisrelevanter, schwieriger Optimierungsprobleme im Vordergrund. Ziel ist die mathematische Analyse der hier auftretenden Modelle und — darauf aufbauend — die Entwicklung und Implementierung effizienter Verfahren zu ihrer Lösung.

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

Gliederung des Bereiches Computer Science

Abteilung Höchstleistungsrechner. Zu den Hauptaufgaben zählt die Auswahl, Bereitstellung und Wartung der erforderlichen Software für den Berliner Landeshochlei-

stungsrechner 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 ab 2002 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 der Hochleistungsrechnersysteme als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Land Berlin und im HLRN. Hinzu kommen statistische Auswertungen der Systemnutzung sowie allgemeine Überwachungsaufgaben.

Abteilung 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 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.

Zunächst werden die Teilbereiche *Numerische Methoden* und *Diskrete Methoden* des Bereichs **Scientific Computing** vorgestellt. 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. Wie im Vorjahr wurden im Berichtszeitraum die folgenden *methodischen* Schwerpunkte bearbeitet:

- Molekulare Konformationsdynamik
- Adaptive Multilevel-FEM
- Optimale Steuerung
- Virtuelle Labore

Sie sind im wesentlichen Weiterführungen von Schwerpunkten des Vorjahres. Aus der Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit wie im Vorjahr in den Feldern

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Medizin: Therapie- und Operationsplanung
- Neurobiologie: Virtuelles Gehirn

- Elektrotechnik: Integrierte Optik
- Chemie- und Verfahrenstechnik: Prozeßsimulation
- Physik: Gravitationsphysik

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

Molekulare Konformationsdynamik. Dieses Thema wird am ZIB in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Ch. Schütte (FU, Mathematik) bearbeitet. Ziel war wie im Vorjahr der Entwurf von Medikamenten auf der mathematischen Basis der Analyse *metastabiler Konformationen*. Dabei beuten wir die mathematischen Nebenwirkungen im weitab liegenden Gebiet des *Data Mining* gerne aus – zeigen sie doch in schöner Weise die Rolle der Mathematik als “Spinne im Netz”. Die deterministisch-stochastische Behandlung der Dynamik von Molekülen führt auf einen stochastischen Übergangsopeator, dessen naive Diskretisierung zu einer *kombinatorischen Explosion* in der Anzahl der Diskretisierungsboxen führen würde. Die Vermeidung des “Fluchs der Dimension” wurde im Rahmen einer Dissertation (Galliat) auf dem Weg über selbstorganisierende Abbildungen (SOM: self-organizing maps) nach KOHONEN angegangen. Dabei wurde das Punktkonzept SOM erfolgreich auf ein Mengenkonzept erweitert, die SOBM-Methode (SOBM: *self-organizing box maps*). Mit der neuen Methode haben sich die Erfolgsaussichten nun auch für größere Moleküle deutlich verbessert.

Bis Ende 2001 wurden 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. Seit Mitte 2001 wird eine Nachwuchsgruppe (F. Cordes) zum Thema *Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening* im neugegründeten Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) gefördert (vergleiche dazu das Vorwort). Nach wie vor besteht in diesem Projekt eine Anbindung an die Biotech-Firma AnalytiCon Discovery, Potsdam. Der Aspekt Data Mining wurde auch 2001 von der Firma Risk-Consulting, Prof. Dr. Weyer. zum Teil finanziell unterstützt.

Arbeiten zum Thema Moleküldynamik werden auch in das zukünftige DFG-Forschungszentrum (FZ) *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (vergleiche Vorwort) einfließen, wobei dort insbesondere reduzierte Modelle für Proteine im Vordergrund stehen sollen. Auch der im Juni 2001 äußerst positiv vorbegutachtete SFB 1946 soll sich dieser Thematik teilweise widmen, allerdings mehr vom Grundlagenstandpunkt aus: Leitmotiv ist hier eine Übertragung der in der Moleküldynamik entwickelten mathematischen *Konzepte* in die Klima- und Umweltwissenschaften. Was die Moleküldynamik angeht, sollen hier Oligopeptide im Vordergrund stehen, die ja gerade wegen ihrer Kleinheit als Medikamente in Frage kommen (sie müssen Nanoporen in der Wand von Blutgefäßen durchdringen können). Die eigentliche Begutachtung dieser SFB-Initiative wird allerdings, nach Verschiebung wegen des Zuschlags des DFG FZ, der im Mai 2002 erfolgt ist, nun erst im Juli 2002 stattfinden.

Integrierte Optik. Dieser Schwerpunkt hat im Berichtszeitraum einen enormen Aufschwung genommen. Darin wird die Simulation integriert-optischer Halbleiterkomponenten bis hin zur Signalübertragung auf optischen Glasfasernetzen bearbeitet. Methodische Quelle unserer Aktivitäten ist die *Laplace-Domain-Methode*, die von F. Schmidt Ende 2001 in seiner Habilitationsschrift erstmals zusammenfassend dargestellt wurde. Sie gestattet die Konstruktion besonders effizienter neuartiger Algorithmen zu diskreten transparenten Randbedingungen für alle Arten von Wellengleichungen (vorzugsweise Elektrodynamik, aber auch Akustik). Diese Forschungsaktivitäten spielten eine wichtige Rolle bei der Einwerbung von Drittmitteln in den BMBF-geförderten Verbundprojekten *Photonische Kristalle* und *Optik Design*. Auch innerhalb des frisch genehmigten DFG FZ werden Themen der optischen Technologien in Theorie und Anwendung bearbeitet werden.

Arbeiten zur linearen und zur nichtlinearen Schrödingergleichung wurden von der DFG in zwei Einzelprojekten gefördert. Letztere bildeten zugleich die Grundlage einer Kooperation mit der Arbeitsgruppe E. Voges (Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik, Universität Dortmund). Die seit Jahren vom BMBF geförderte Entwicklung von adaptiven Mehrgitterlösern für Eigenmoden optischer Wellenleiter (skalarer und vektorieller Fall) wurde im Berichtszeitraum erfolgreich abgeschlossen. Mit Unterstützung von Infineon und ZIB wurde darauf aufbauend die Spin-off-Firma *JCMWave* gegründet. Sie hat sich zum Ziel gesetzt, die am ZIB entstandenen Algorithmen in ein kommerzielles Produkt weiterzuentwickeln.

Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle. Dieser neue Schwerpunkt ersetzt den bisherigen Schwerpunkt Prozeßsimulation. Die Umbenennung bringt zugleich eine Erweiterung und Verschiebung des Anwendungsschwerpunkts in Richtung Biologie und Medizin zum Ausdruck. Die langjährige DFG-geförderte Kooperation mit der Arbeitsgruppe R. Adler (Ingenieurwissenschaften, Universität Halle-Wittenberg) zum Thema Kombinationsreaktoren wurde im Berichtszeitraum erfolgreich zum Abschluß gebracht. Die ebenfalls langjährige Kooperation mit der Arbeitsgruppe K. Schaber (Verfahrenstechnik, Universität Karlsruhe) wird nochmals bis Ende 2002 weitergefördert und sodann ebenfalls zum Abschluß kommen.

Neu aufgenommen wurden Arbeiten zur muskuloskelettalen Modellierung und Simulation der Tibia im Rahmen einer frisch genehmigten Klinischen Forschergruppe (DFG), die mit N. Haas und G. Duda (Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU) begonnen worden sind. In diesen Arbeiten soll das erwartete dynamische Verhalten orthopädischer Prothesen untersucht werden. Sie sollen im Rahmen des DFG FZ in Kooperation mit R. Kornhuber (FU, Mathematik) theoretisch und algorithmisch weiter vorangetrieben werden, insbesondere in Richtung monotone Mehrgittermethoden. In dem geplanten SFB 1946, der ja erst zur Genehmigung ansteht, soll die Dynamik der Duftcodierung bei Honigbienen in Kooperation mit R. Menzel und G. Galizia (FU, Neurobiologie) und dem Zuse-Fellow R. Hochmuth (Universität Freiberg) untersucht werden. Für das Projekt "Dynamische Dimensionsreduktion bei CVD-Reaktoren" im Rahmen der BMBF-Verbundförderung "Anwendungsbezogene Mathematik" konnte

im Berichtszeitraum nach langer Suche endlich ein qualifizierter Mitarbeiter gefunden werden, der sich derzeit in diese Thematik einarbeitet. Wie im Vorjahr konnten durch Software-Lizenzen (LIMEX, NLEQ) erfreuliche zusätzliche Einnahmen aus der Industrie erzielt werden.

Optimale Steuerung. Diese Arbeiten werden erstmals gemeinsam mit Arbeiten der Arbeitsgruppe *Diskrete Methoden* in dem Schwerpunkt *Nichtlineare Optimierung und Steuerung* aufgeführt. Im Berichtszeitraum wurde die zweite Auflage des Lehrbuchs *Numerische Mathematik II. Gewöhnliche Differentialgleichungen* von P. Deuffhard und F. Bornemann (erschienen Anfang 2002) im Umfang von ca. 200 Seiten vollständig überarbeitet und erweitert, im wesentlichen vom Erstautor. Sie enthält nun ein neues Kapitel über Randwertprobleme und Probleme der optimalen Steuerungen mit zahlreichen bisher unpublizierten Resultaten. Die Übersetzung ins Englische durch W. C. Rheinboldt (!) soll bei Springer im Sommer 2002 erscheinen. Ein weiterer Beitrag baut auf die bereits im Vorjahr erwähnte funktionenraumbasierte Innere-Punkt-Methode (M. Weiser, P. Deuffhard) auf, bei der die Vorzüge *direkter* und *indirekter* Methoden zur Lösung von Problemen der *optimalen Steuerung* konzeptionell vereint werden sollen. Diese Arbeiten bilden die Basis für ein Projekt innerhalb des DFG FZ in Kooperation mit F. Tröltzsch (TU, Mathematik), in dem die Übertragung auf partielle Differentialgleichungen im Mittelpunkt steht. Eine erste Anwendung soll das neue Verfahren in der Hyperthermieplanung finden – siehe den nachfolgenden Schwerpunkt.

Computergestützte Therapieplanung. Dieser seit mehreren Jahren laufende Schwerpunkt hat sich weiter entfaltet. Im Mittelpunkt stand die Entwicklung eines 3D-Systems zur präoperativen Planung von knochen- und weichgewebeverlagernden Eingriffen in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie. Aufgrund der vielfältigen Vorarbeiten erreichte das auf AmiraTM basierte System sehr schnell einen Reifegrad, der es erlaubte, klinische Fälle in Zusammenarbeit mit den MKG-Chirurgen F. Zeilhofer und R. Sader (TU München, Klinikum rechts der Isar) erfolgreich zu planen. Ein wegweisender Schritt war die wohl weltweit erstmalige Mimiksimulation auf Basis eines individuellen, anatomisch korrekten Modells. Das Softwaresystem wird ab 2002 so erweitert, dass die Planung künftig auch netzverteilt und kooperativ in Zusammenarbeit von mehreren Experten vorgenommen kann (Förderung durch BMBF/DFN ab Frühjahr 2002).

Im Rahmen des SFB 273 “Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie”, der noch bis Ende 2002 läuft, wurde an der nicht-invasiven, MR-basierten Ermittlung der 3D-Temperaturverteilung und Durchblutung des Patienten gearbeitet. Diese soll zur optimalen Steuerung der Antennen verwendet werden. Technische Grundlage ist ein neu installiertes Hyperthermiesystem in Berlin-Buch, das mit einem MR-Tomographen kombiniert ist. Es zeigte sich, daß für eine hinreichende Genauigkeit weitere meßtechnische und methodische Verbesserungen erforderlich sind.

Neue Themenbereiche waren die 3D-Ultraschall-basierte, intraoperative Navigation

und Operationsplanung für die Leberchirurgie (Kooperation: Arbeitsgruppe P. Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch, HU Berlin) sowie die computergestützte individuelle, beanspruchungsgerechte Frakturversorgung (Kooperation: Arbeitsgruppe N. Haas, G. Duda, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin). Im zweitgenannten Projekt soll ein biomechanisch fundiertes Operationsplanungssystem entwickelt werden, das es erlaubt, die individuellen Belastungen bei typischen Bewegungsabläufen wie auch die individuelle Knochenqualität zu berücksichtigen.

Biomedizinische Bildverarbeitung. Ziel dieses Schwerpunkts ist die Entwicklung vielseitiger, robuster Verfahren zur Rekonstruktion von Geometrien aus 3D-Bildstapeln. Die Bearbeitungspipeline umfaßt Methoden zur Vorverarbeitung und Verbesserung von Bildern, zur mono- und multimodalen Registration, zur Segmentierung und Feature-Extraktion. Im Berichtszeitraum wurden für alle Bearbeitungsstufen wesentliche Fortschritte erzielt.

Es wurden Verfahren zur blinden und nicht-blinden Entfaltung von 3D-Bildstapeln entwickelt, die die konventionelle 3D-Mikroskopie wie auch konfokale Laser-Scanning-Mikroskopie unterstützen. Des weiteren wurden Algorithmen zur präzisen Alignierung von Einzelbildern aus Bildstapeln sowie zum nahtlosen Zusammenfügen von mehreren Schnittbildstapeln entwickelt. In Kooperation mit den Image Guidance Laboratories (IGL, Stanford University) wurden neue hierarchische Verfahren zur multimodalen affinen und elastischen Registrierung in das Softwaresystem AmiraTM integriert. Für die Segmentierung insbesondere von MR-Bilddaten wurden Verfahren entwickelt, die Vorwissen über die Form des zu segmentierenden Objekts nutzen. Diese sollen künftig im Rahmen des DFG FZ mathematisch vertieft werden.

Im Rahmen von zwei internationalen Projekten einerseits zur Analyse von Mikrogefäßen (mit INSERM und IMFT, Toulouse sowie INRIA, Sophia Antipolis) und andererseits zur Analyse von Knochen (mit UKBF FU Berlin, Univ. Potsdam, Aarhus Univ.) wurden neue Verfahren zur Mittellinien- und Mittelflächen-Extraktion sowie angepaßte Visualisierungsverfahren entwickelt. Inhalt eines weiteren Projekts sind Methoden zur 3D-Rekonstruktion von Hohlräumen in der Bronchoskopie mit Hilfe eines Lichtring-Endoskops.

Virtuelle Labore. Die Software-Plattform AmiraTM wurde in vielerlei Hinsicht weiterentwickelt. Das neue Release 2.3 enthält eine Vielzahl neuer Verfahren zur interaktiven Bearbeitung von Bilddaten und Dreiecksnetzen sowie zur quantitativen Auswertung. Des weiteren wurde mit der Entwicklung einer speziellen Version für immersive Stereo-Display-Systeme begonnen. Die methodischen Entwicklungen für das *Virtuelle Neurolabor*, etwa zur modellbasierten Extraktion von einzelnen Nervenzellen oder zur Registration für die Integration funktioneller Daten, wurden fortgeführt und erfolgreich auf biologische Fragestellungen angewendet. Diese Arbeiten bilden die Basis für ein neurobiologisches Projekt zur mathematischen Modellierung und Simulation im Rahmen des beantragten SFB 1946 (siehe oben).

Die in den vergangenen Jahren entwickelte Vielzahl von Visualisierungs- und Ana-

lysemodulen für das *Virtuelle Molekül-Labor* wurden aufeinander abgestimmt, in der Erweiterung AmiraMol gebündelt und ab August 2001 als Testversion frei verfügbar gemacht. Weiterhin wurden neue Verfahren entwickelt zum interaktiven Editieren von Molekülen, zum flexiblen Selektieren von Molekülbestandteilen, zur Visualisierung von Konformationen, zur schnellen Erzeugung von Moleküloberflächen, zur Sequenz-Struktur-Alignierung, zur Kovarianzanalyse molekularer Freiheitsgrade auf Basis von Konformationen und zur Alignierung ausgewählter Teilmengen von Konformationen.

Das *virtuelle Astrophysik-Labor* wurde in Kooperation mit mehreren internationalen Partnern weiterentwickelt. Das allgemeine, durch Faserbündeltheorie inspirierte Datenmodell wurde weiterentwickelt und erlaubt nun eine elegante Formulierung der Algorithmen für die in verschiedenen Koordinatensystemen und auf unterschiedlichen Gittertypen gegebenen allgemein-relativistischen Daten. Ein methodischer Schwerpunkt war die Entwicklung von effizienten Multilevel-Verfahren zur Darstellung von Skalarfeldern auf sehr großen uniformen und hierarchischen Gittern.

Der Bereich **Diskrete Methoden** setzt sich aus den Abteilungen *Optimierung* und *Wissenschaftliche Informationssysteme* zusammen. Die Aktivitäten reichen von der mathematischen Modellierung realer Prozesse, über die theoretische Grundlagenforschung und die algorithmische Umsetzung der Theorie, bis hin zum Transfer in die Praxis. Der neue, abteilungsübergreifende Schwerpunkt „Nichtlineare Optimierung und Steuerung“ legt den Grundstein für eine weitergehende Ausnutzung von Synergien im Hause.

Wie in den vergangenen Jahren legten wir besonderen Wert auf die Verflechtung von Theorie und Praxis. Dabei inspirierten konkrete praktische Probleme häufig neue theoretische Fragestellungen. Umgekehrt erlaubten neugewonnene theoretische Erkenntnisse und deren algorithmische Implementierung die Lösung von Anwendungsproblemen neuer Dimensionen. Der Erfolg dieses Konzepts wird u. a. dokumentiert durch zahlreiche Drittmittelförderungen (von Seiten des BMBF, der DFG, der EU, des DFN und vieler Industriefirmen) und Auszeichnungen für Mitarbeiter der Abteilung (Ruf auf eine C3-Proessur für Mathematik an der Universität Kaiserslautern für Christoph Helmberg, Mannesmann-Innovationpreis 2001 für Roland Wessäly).

Die Aktivitäten unseres Bereichs im Berichtszeitraum 2001 gliedern sich in folgende Schwerpunkte:

Optimierung

- Diskrete Strukturen
- Nichtlineare Optimierung und Steuerung
- Telekommunikation
- Ganzzahlige Optimierung
- Online-Optimierung

- Verkehr

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)
- CARMEN – Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen
- Math&Industry

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 große 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? Viele Optimierungsprobleme auf Graphen sind effizienter lösbar, wenn man eine Baumzerlegung des Graphen mit geringer Baumweite zur Verfügung hat. In der Praxis ist die Ausnutzung dieses Konzeptes bislang jedoch überraschend selten anzutreffen; wir verfolgen diesen Ansatz nun systematisch, beispielsweise in geeigneten Frequenzplanungsproblemen. Das Finden optimaler Triangulierungen von Polyedern und Punktfigurationen – in Dimension zwei ein Schwerpunkt in der algorithmischen Geometrie – erfordert Kenntnisse über die Struktur des Raums aller Triangulierungen der Punktfiguration. 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 und Steuerung. In diesem gemeinsamen Schwerpunkt mit der Abteilung „Numerische Analysis und Modellierung“ werden nichtlineare Modelle zur Optimalsteuerung, zur stochastischen Optimierung und zur möglichst strukturnahen Relaxierung kombinatorischer Optimierungsprobleme zum Einsatz gebracht. Die Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen erfordert per se nichtlineare Modelle. Für dynamische Portfolio-Optimierung sowie die Steuerung chemischer Prozesse unter unsicheren Daten erzwingt die Stochastik Nichtlinearitäten im Optimierungsmodell.

Semidefinite Programme liefern momentan die besten bekannten unteren Schranken für Frequenzzuweisungsprobleme im Mobilfunk; der am ZIB wesentlich mitgeprägte Stand der Technik in der semidefiniten Programmierung legt daher sogar das freiwillige Inkaufnehmen von Nichtlinearitäten nahe, um Relaxierungen zu formulieren, die einerseits der Problemstruktur besser angepaßt sind als lineare Relaxierungen, andererseits aber noch praktisch ausgewertet werden können.

Telekommunikation. Die Stimmung in der Telekommunikationsindustrie ist seit dem Einbruch des Neuen Marktes geprägt von Hoffnungen in die neuen Technologien UMTS und optische Netze. ZIB-Mitarbeiter sind an der Umsetzung dieser Schlüsseltechnologien von Anfang an beteiligt: im EU-geförderten Verbundprojekt MOMENTUM werden im ZIB und in der ZIB-Spin-Off-Firma *Atesio GmbH* Algorithmen für die Planung der UMTS-Funkschnittstelle entwickelt; Aufgaben der parallelen Implementierung werden ebenfalls im ZIB (Bereich „Computer Science“) übernommen. In Kooperation mit der Telekom-Innovationsgesellschaft T-Systems Nova wird die ausfallsichere (statische und dynamische) Konfiguration transparenter optischer Netze untersucht. Gefördert wird dieses Projekt vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (DFN), mit dem wir auch die kostengünstige und ausfallsichere Konfiguration des Gigabit-Wissenschaftsnetzes mit Hilfe von produktionsstauglichen Planungstools sicherstellen. Weitere Projekte in der Frequenzplanung, Standortplanung, Last-Ausgleichung und Performance-Analyse in Telekommunikationsnetzen wurden im Berichtszeitraum in Zusammenarbeit mit E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), der Telekom Austria AG (Wien, Österreich) und der Siemens AG (München) erfolgreich weitergeführt. Als Service für die Industrie und Wissenschaft unterhält das ZIB einen Server für Informationen verschiedenster Art zu Frequenzzuweisungsproblemen (FAP-Server). Hier können interessierte Anwender und Entwickler u. a. Benchmark-Datensätze für Frequenzzuweisungsprobleme aus der Praxis abrufen.

Ganzzahlige Optimierung. Die ganzzahlige Optimierung ist seit Jahren ein Schwerpunkt unserer Arbeitsgruppe. Im Berichtszeitraum stand 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. Die am ZIB gepflegte Testdatenbank für Steinerbaumprobleme sowie die Entwicklung der Modellierungssprache *Zimpl* unterstützt Vergleichbarkeit von Forschungsergebnissen sowie die Beschleunigung der Turn-around-Zeiten bei Modellierung – Implementierung – Rechnung – Evaluierung in der ganzzahligen Optimierung.

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. Im Berichtszeitraum hat sich z. B. unser Algorithmus zur Fahrzeugeinsatzplanung beim Allgemeinen Deutschen Automobilclub (ADAC) durchgesetzt und wird in der Praxis – nachimplementiert von der Firma Intergraph Public Safety (IPS) – zum Einsatz kommen. Zur Analyse von Online-Algorithmen setzen wir als mathematisches Hilfsmittel sowohl klassische Methoden (kompetitive Analyse, Simulation) als auch neue Methoden (vertretbare Belastung) ein. Die Projekte dieses Themenkreises werden gefördert von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (DFN) und dem ADAC. Desweiteren kooperieren wir mit der Fiege eCom (Berlin) und der T-Systems Nova (Berlin).

Verkehr. Wir leisten in diesem Schwerpunkt einen mathematischen Beitrag zur Optimierung von Verkehrssystemen. Neben unseren Projekten im öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV) engagieren wir uns seit dem Berichtszeitraum nun auch in der Transportlogistik. Unsere Projekte erstrecken sich von der mathematischen Grundlagenforschung bis zur betrieblichen Anwendung. Wir arbeiten im ÖPNV-Bereich nun auch an der integrierten Umlauf- und Dienstplanung; im Logistikbereich untersuchen wir das Management regional verteilter Lager. Erfolgreiche Testrechnungen mit unserem neuen integrierten Umlauf- und Dienstplanungsverfahren für den ÖPNV zeigen, daß in Zukunft diese beiden Planungsschritte für geeignete Verkehrsbetriebe verschmolzen werden können. Im Berichtszeitraum sind unsere Verfahren bei weiteren Betrieben in den praktischen Einsatz gelangt (Beispiele: Umlauf- und Dienstplanung bei den Stadtwerken Bonn, Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben). Unsere Kooperationspartner im ÖPNV-Bereich sind zwei marktführende Softwarehäuser, die IVU GmbH (Berlin) und die Mentz Datenverarbeitung GmbH. Auf der nächsten Transferebene kooperieren wir mit den Verkehrsbetrieben von Berlin (BVG) und Regensburg (RVB) – insbesondere mit den Mitarbeitern der operativen Planung–, um die mathematischen Ideen bereits in der Entwicklungsphase mit den Erfordernissen der betrieblichen Praxis zu verknüpfen. Im Logistik-Bereich kooperieren wir mit der Fiege eCom, die u. a. die drei Läger der Herlitz PBS AG im Berliner Raum organisiert.

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

Neben den beiden methodisch orientierten Forschungsschwerpunkten Grid Computing sowie Cluster und Systemnetzwerke haben wir im Berichtszeitraum auch in einer Anwendungsdisziplin, der Bioinformatik gearbeitet (siehe auch 2.2.13, S. 122). Bioinformatik-Anwendungen sind für uns ein besonders interessantes Studienobjekt, weil sich zum einen mit dem wachsenden Umfang der Sequenz- und Strukturdatenbanken ein sehr hoher Rechenzeitbedarf ergibt, der allein schon eine Parallelisierung rechtfertigt, und zum anderen Klassen von bioinformatischen Anwendungen (z.B. zur Strukturvorhersage) mit ihren breiten Datenströmen sehr große Anforderungen an die Bandbreite und Latenzzeit der internen Verbindungsnetzwerke der Parallelrechner stellen.

Grid Computing. Im Forschungsschwerpunkt Grid Computing lag unser Hauptaugenmerk in der Entwicklung besserer Methoden zum Management geographisch verteilter Ressourcen. Unter „Ressourcen“ verstehen wir nicht nur eine Ansammlung von 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. in den Projekten GAMESS-UK und 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 Hochlei-

stungsrechner zur Auswertung der in den LHC-Experimenten (LHC = large hadron collider) anfallenden Daten konzipiert und installiert werden soll. Diese Datenmengen sind so groß, daß eine alleinige Speicherung und Auswertung der Daten auf den Rechnern des CERN nicht mehr möglich ist. *DataGrid* ist damit 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. Wir haben im Berichtszeitraum damit begonnen, eine Systemarchitektur zur effizienten Einbettung lokaler Clustersysteme in die übergeordnete (gleichfalls erst zu entwickelnde) Datagrid-Software zu erarbeiten. Eine besondere Herausforderung liegt in der Größe der lokalen Cluster, die ca. 5000 Rechenknoten umfassen werden. Dies erfordert besondere Maßnahmen für ein dynamisches Fehlermanagement.

Cluster und Systemnetzwerke. Nachdem wir im Jahr 2000 in Kooperation mit der Freien Universität Berlin einen kleinen Linux-Cluster für Forschungs- und Entwicklungsarbeiten aufgebaut hatten, galt unser Forschungsinteresse im Berichtszeitraum der Entwicklung und dem Test eines Linux-Treibers für das *Scheduled Transfer*-Übertragungsprotokoll auf Gigabit-Ethernet Adapterkarten. Erste Ergebnisse sind vielversprechend. Sie 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. Ein weiterer Vorteil besteht in der Durchgängigkeit: Dasselbe Protokoll kann sowohl in lokalen als auch in Weitverkehrs-Netzwerken benutzt werden - eine wichtige Eigenschaft für den Einsatz im Grid Computing.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Molekulare Konformationsdynamik

Dieser seit Jahren erfolgreich laufende Schwerpunkt hat im Berichtszeitraum zu einer Reihe von Verbundprojekten beigetragen: seit Juli 2001 läuft das BMBF-Verbundvorhaben "Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik", kurz BCB, an dem FU, HU, ZIB, MPI für Molekulare Genetik und MDC Berlin beteiligt sind. Themen dieser allgemeinen Richtung sollen ab Mitte 2002 im Bereich "Life Science" des DFG-Forschungszentrums eine Rolle spielen (hier für Proteine) sowie in dem bereits vorbegutachteten SFB 1946, der erst Mitte 2002 endgültig begutachtet wird (dort liegt der Fokus auf Oligopeptiden).

Selbstorganisierende neuronale Netze

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Tobias Galliat, Marcus Weber, Rainer Roitzsch, 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

Im Berichtszeitraum wurde die Entwicklung der Theorie zur statistischen Beschreibung der Dynamik von Konformationsänderungen molekularer Systeme und ihre algorithmische Realisierung weiter vorangetrieben. Wie bereits in der Vergangenheit gezeigt werden konnte, läßt sich die Identifikation von metastabilen Konformationen auf die Lösung des Perron Cluster Eigenwertproblems für den die Dynamik widerspiegelnden Markov-Operator zurückführen. Allerdings muß hierzu der Operator geeignet diskretisiert werden. Als eine robuste Diskretisierungsmethode, die auch bei steigender Komplexität des untersuchten Moleküls anwendbar bleibt, haben sich selbstorganisierende neuronale Netze erwiesen. Insbesondere der Self-Organizing Box Maps (SOBM) Algorithmus, der eine selbstentwickelte Erweiterung des bekannten SOM-Algorithmus von KOHONEN ist und eine Box-Diskretisierung erzeugt, hat sich als leistungsfähig erwiesen [5]. Abbildung 2.1 zeigt die Projektion einer mittels des SOBM-Algorithmus automatisch erzeugten Box-Diskretisierung auf zwei ausgewählte Torsionswinkel des HIV Protease Inhibitors VX-478.

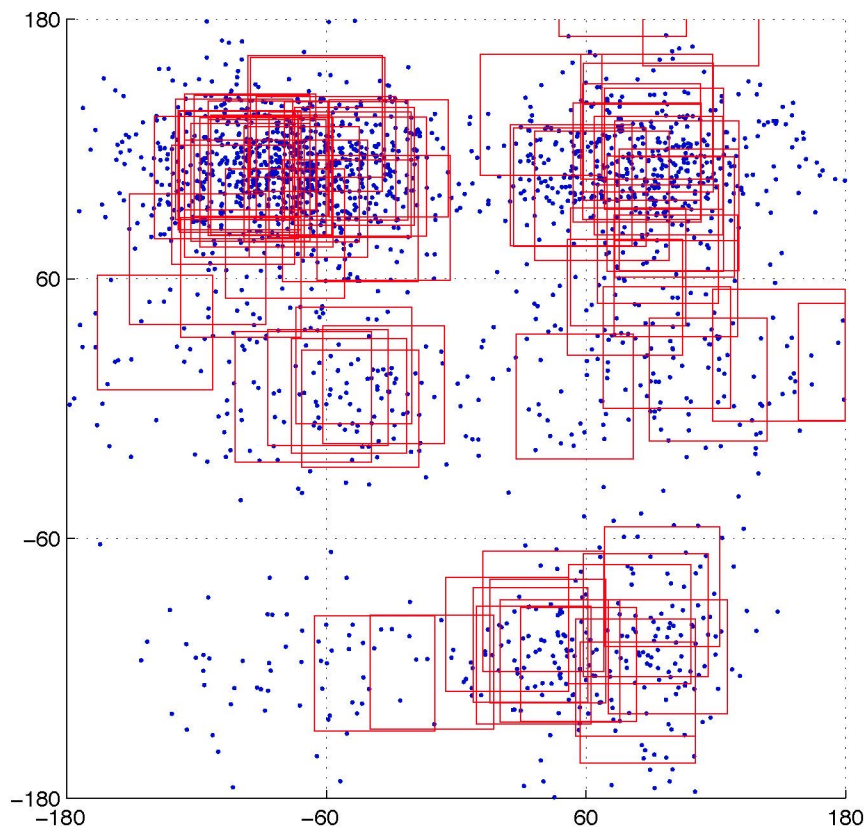


ABBILDUNG 2.1: Projektion einer mittels des SOBM-Algorithmus erzeugten Box-Diskretisierung auf zwei ausgewählte Torsionswinkel des HIV Protease Inhibitors VX-478.

Allerdings hat es sich bei mehreren Testanwendungen als nachteilig herausgestellt, daß die Güte der Diskretisierung von der vorgegebenen Anzahl der Neuronen des neuronalen Netzes abhängt. Deshalb wurde im vergangenen Jahr der SOBM-Algorithmus zusammen mit dem bereits früher entwickelten Algorithmus zur Perron-Cluster-Analyse in einen Multilevel-Ansatz eingebettet [4]. Dieser ermöglicht eine automatische Verfeinerung der Diskretisierung an den Stellen, wo sie zu grob ist. Insbesondere die Übergangsbereiche zwischen den Konformationen werden oftmals nicht fein genug diskretisiert. Momentan ist die Identifizierung dieser Übergangsbereiche noch relativ aufwendig, allerdings haben sich erste Ansätze, die auf Konzepten der Fuzzy-Set-Theorie basieren, als vielversprechend erwiesen. Neben der Entwicklung von Verfeinerungsstrategien wurden auch wichtige Schritte hin zu einem verbesserten Konvergenzverhalten des SOBM-Algorithmus unternommen. Zum einen wurde der Algorithmus um ein sogenanntes Neuronen-Pruning ergänzt: Durch die automatisierte Eliminierung von überflüssigen Neuronen wird die Architektur des neuronalen Netzes vereinfacht und somit mittelbar die Berechnung der Diskretisierung beschleunigt. Als angenehmen Nebeneffekt verhindert Neuronen-Pruning zudem die Entstehung von sogenannten Pseudo-Clustern, d.h. von Clustern, die eine künstliche Metastabilität aufgrund ihres geringen statistischen Gewichts besitzen. Desweiteren wurde ein Kriterium entwickelt, das die Trainingsphase des SOBM-Algorithmus automatisch beendet, wenn die erzeugte Box-Diskretisierung näherungsweise optimal ist. Dies vermeidet unnötige Konvergenzschritte. Eine methodisch grundlegende Weiterentwicklung soll in einem Teilprojekt des beantragten SFB 1946 bearbeitet werden (Entscheidung steht aus).

Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening

Bearbeitet von: Frank Cordes, Michael Meyer, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: L. Müller-Kuhrt, G. Jas (AnalytiCon Discovery GmbH, Potsdam); Ch. Schütte, W. Huisinga, A. Fischer (FU); Nachwuchsgruppe (BCB/ZIB) „Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern“; Nachwuchsgruppe (BCB/HU) „3-D strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement“

Förderung: Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Berlin aus Mitteln der Europäischen Union (EFRE); Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB); AnalytiCon Discovery GmbH (Potsdam)

Im vorliegenden Projekt zum Virtuellen Screening (VS) soll ein computer-gestütztes Verfahren aufgebaut werden, welches eine effiziente Bewertung der Bindungsaffinität von sehr vielen Liganden an gegebene Targetmoleküle vornimmt. Die Anwendung auf pharmazeutische Ligandendatenbanken und krankheitsspezifische Targetmoleküle soll in Ergänzung zu experimentellen Hochdurchsatz-Verfahren das Verständnis des Bindungsprozesses verbessern und den gezielten Entwurf von neuen Medikamenten erleichtern. Durch die Analyse metastabiler Konformationen für eine gegebene Menge

von Liganden und Targets sollen strukturelle Datenbanken von Molekülen so ergänzt werden, daß die Qualität und Effizienz von VS-Verfahren unter Ausnutzung metastabiler Moleküleigenschaften verbessert wird. In einer ersten Näherung soll der Bindungsprozess durch ein Docking verschiedener metastabiler Konformationen der Liganden an ein Targetmolekül beschrieben werden (Abbildung 2.2).

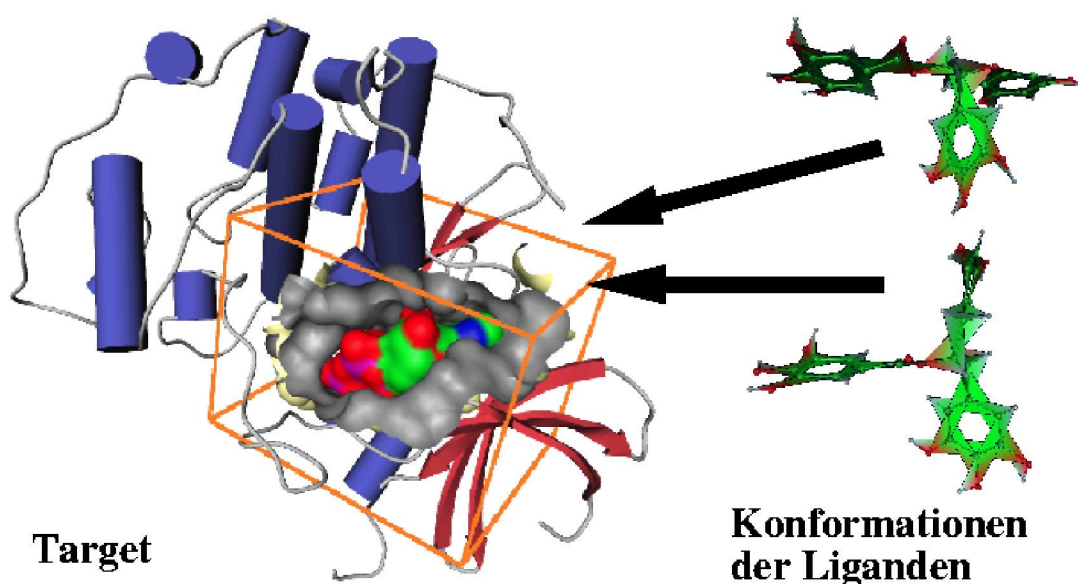


ABBILDUNG 2.2: Schematische Darstellung der Bindung von metastabilen Konformationen eines potentiellen Inhibitors (rechts) an das aktive Zentrum (Box) einer Cyclin abhängigen Kinase.

Um diesen Schritt zu realisieren, wurden zunächst kleinere Ligandenbibliotheken um bis zu 1000 Molekülen und Targetdaten für das VS-Verfahren präpariert. Die Ligandendaten stammen aus der 2D-Naturstoffbibliothek des industriellen Kooperationspartners AnalytiCon Discovery (Potsdam), aus einem 3D-Auszug des „Available Chemical Directory“ sowie aus dem Testdatensatz des verwendeten Merck Molecular Force Fields (MMFF). Targetsysteme basieren bisher auf Röntgenstrukturdaten der Protein Datenbank von HIV-Protease, Cyclin-abhängigen Kinasen, Thrombin und Dihydrofolate Reduktase. Es wurde ein Programm entwickelt, mit dem die Präparation von Ligandendaten weitgehend automatisch verläuft. Kraftfelddaten werden an gegebene Molekültopologien gekoppelt, so daß stereochemisch sinnvolle Startgeometrien erzeugt werden können. Da viele 2D- und in der Regel auch 3D-Röntgenstrukturdaten keine Information über Wasserstoffe enthalten, müssen offene Valenzen durch Wasserstoffatome aufgefüllt werden. Der Ladungszustand der Gruppe bestimmt dabei den Protonierungszustand. Bei unzureichender chemischer Information können fehlende Molekül Daten interaktiv mit dem am ZIB entwickeltem Visualisierungsprogramm „Amira“ modelliert werden (siehe Virtuelles Moleküllabor, Schwerpunkt 2.2.6).

Die Simulation der Konformationsdynamik und Konformationsanalyse der Simulationsdaten wurden in der Uncoupling/Coupling Methode [1] miteinander kombiniert. In einem hierarchischen Protokoll werden Simulationen bei verschiedenen Temperaturen innerhalb metastabiler Zustandsbereiche durchgeführt, die auf dem jeweils höheren Hierarchielevel unter Verwendung selbstorganisierender neuronaler Netze [5] identifiziert wurden. Die Simulationstemperatur wechselt adaptiv zwischen den Temperaturen zweier Level [2], um einerseits Energiebarrieren zu überwinden und andererseits eine Umgewichtung auf die niedrigste Temperatur des hierarchischen Protokolls zu gewährleisten. Die Methode wurde zunächst erfolgreich auf ein kleines Molekül (Pentan) angewandt [3]. Das Programm ist vollständig parallelisiert und wird zur Zeit an größeren Liganden getestet.

Die Durchführung des Dockings erfordert eine genaue Analyse und Präparation der Targetdaten, insbesondere des aktiven Zentrums. Hierfür wurden Molekülkomponenten für das Visualisierungsprogramm „Amira“ entwickelt, die es ermöglichen, aus dem Energie-Potential der Targets Pharmakophor-Modelle abzuleiten, die die essentiellen pharmazeutischen Eigenschaften der Targets wiedergeben. Ein ähnliches Verfahren wurde schon zu Beginn des Jahres auf die Konformationen aktiver Liganden angewandt und konnte erfolgreich für die Wirkstoffsuche in Konformationsdatenbanken eingesetzt werden. Zur Zeit werden Tests durchgeführt, solche Pharmakophormodelle auch für die Vorkonditionierung von Dockingalgorithmen einzusetzen.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

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

Im Bereich Data-Mining, dessen Ziel die Entwicklung und Anwendung effizienter Methoden zur automatischen Analyse von hochdimensionalen Daten ist, wurden in Kooperation mit der Firma Risk-Consulting, J. Weyer, Köln, aus Daten der deutschen privaten Krankenversicherung ein diagnosespezifisches Prognosemodell zur Vorhersage der zu erwartenden Gesundheitsausgaben ambulanter Bluthochdruckpatienten entwickelt. Desweiteren wurde durch neue theoretische Ergebnisse der Kreis der Anwendungsgebiete der bisher entwickelten Methoden erweitert [4]. Die Weiterentwicklung der Algorithmen in Richtung parallelisierbarer Verfahren, sowie eine Verbesserung der Konvergenzeigenschaften des Self-Organizing Box Maps (SOBM) Algorithmus, ist wichtiger Bestandteil der Planungen für den kommenden Berichtszeitraum.

Publikationen

- [1] A. Fischer. *An Uncoupling-Coupling Technique for Markov Chain Monte Carlo Methods*, Report 00-04, ZIB, 2000.
- [2] A. Fischer, F. Cordes, and C. Schütte, *Hybrid Monte Carlo with adaptive temperature choice: efficient conformational analysis of RNA*, Comput. Phys. Comm. 121–122 (1999), 37–39.

- [3] A. Fischer, Ch. Schütte, P. Deuffhard, and F. Cordes. Hierarchical uncoupling-coupling of metastable conformations. In [6].
- [4] T. Galliat. *Adaptive Multilevel Cluster Analysis by Self-Organizing Box Maps*. PhD thesis, Freie Universität Berlin, (2002).
- [5] T. Galliat, P. Deuffhard, R. Roitzsch, and F. Cordes. Automatic identification of metastable conformations via self-organized neural networks. In [6].
- [6] T. Schlick and H. H. Gan (editors). *Computational Methods for Macromolecules: Challenges and Applications — Proc. of the 3rd Intern. Workshop on Algorithms for Macromolecular Modelling, New York, 2000*. Springer, 2002, In Press.

2.2.2 Integrierte Optik

Im Schwerpunkt Integrierte Optik werden Projekte von der Simulation integriert-optischer Halbleiterkomponenten bis hin zur Signalübertragung auf optischen Glasfasernetzen bearbeitet. Über die Anwendungen in der Optik hinaus werden die von uns entwickelten Algorithmen auch in der Akustik eingesetzt. Eine mögliche Anwendung in der Klimasimulation soll in dem beantragten SFB 1946 in Kooperation mit R. Klein (PIK, FU) untersucht werden.

Im Mittelpunkt der Arbeiten des Berichtsjahres standen die Weiterentwicklung von Theorie und Algorithmen zur Lösung von optischen Streuproblemen. Die Habilitationsschrift von F. Schmidt [3] gibt erstmals eine zusammenfassende Darstellung des neuen theoretischen Ansatzes — Laplace-Domain-Methode — und der daraus folgenden neuen Algorithmen. In diesen Schwerpunkt gliedern sich auch unsere Arbeiten zu den transparenten Randbedingungen für die lineare, zeitabhängige Schrödinger-Gleichung in zwei Raumdimensionen ein (Förderung durch die DFG).

Weiter bearbeitet wurde ein Projekt zur Simulation der Signalübertragung über optische Fasern im nichtlinearen Bereich, die durch eine nichtlineare Schrödinger-Gleichung modelliert wird (Förderung durch die DFG).

Ein anderer Schwerpunkt der vergangenen Jahre, die Entwicklung eines Mehrgitter-Lösers zur Berechnung der Eigenmoden von optischen Wellenleitern, wurde abgeschlossen. Die mit Unterstützung von Infineon und ZIB gegründete Firma JCMWave hat es sich zum Ziel gesetzt, aufbauend auf diesen Algorithmen ein kommerzielles Produkt zu entwickeln.

Über die Forschungsaktivitäten hinaus hat sich die Arbeitsgruppe intensiv und erfolgreich an bundesweiten Ausschreibungen zur Photonik beteiligt. Beispiele sind die Verbundprojekte *Photonische Kristalle* und *Optik-Design* (Ausschreibungen durch das BMBF) und die Ausschreibung zum DFG-Forschungszentrum mit einem Teilprojekt zur Photonik.

Polbedingung - ein neues theoretisches Konzept zur Charakterisierung von Wellenausbreitungen

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

Wellenphänomene in der Natur lassen sich im allgemeinen als Überlagerung von einzelnen Wellenzügen verstehen, die in verschiedene Richtungen laufen und miteinander interferieren. Die physikalische Natur der Wellenausbreitung verlangt es, daß Wellen, die durch endliche Hindernisse reflektiert, gebeugt oder gebrochen werden (Abbildung 2.3), in großem Abstand von diesen Hindernissen nur eine Bewegungsrichtung besitzen. Solche Wellen werden als auslaufende oder ausstrahlende Wellen bezeichnet. Die Wellengleichungen besitzen aber völlig gleichberechtigt neben den auslaufenden Wellen auch hereinlaufende Wellen als Lösung. Um die Eindeutigkeit der mathematischen Lösung zu sichern und um dem physikalischen Tatbestand zu entsprechen, benötigt man neben der Wellengleichung noch eine zusätzliche Bedingung. Für akustische Probleme mit homogenem Außenraum ist das die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung, für elektromagnetische Probleme die eng verwandte Silver-Müller Bedingung. Für Probleme mit *inhomogenem* Außenraum waren äquivalente Bedingungen bislang nicht bekannt. Die Polbedingung [3] schließt diese Lücke. Sie besagt, daß die Lösung einer Differentialgleichung ausstrahlend ist, wenn die Laplace-Transformierte bezüglich einer Abstandsvariablen in der unteren komplexen Halbebene keinen Pol besitzt. Die Polbedingung ist dimensionsunabhängig. Sie ist keine asymptotische Bedingung, sondern gilt auch bei kleinen Abständen vom Hindernis und stellt somit eine attraktive, einheitliche Alternative zu den gebräuchlichen asymptotischen Bedingungen dar, die über Reihendarstellungen formuliert werden.

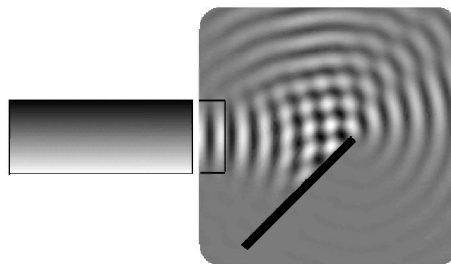


ABBILDUNG 2.3: Beugung und Reflexion des von einer optischen Faser ausgestrahlten Lichts an einem ebenen Hindernis.

Folgende zentrale theoretische Resultate konnten mit Hilfe der Theorie der Polbedingung erbracht werden: Bereits im Vorjahr konnten wir beweisen, daß die Polbedingung für Helmholtz-Gleichungen mit abstandsabhängigem Potential in beliebigen Raumdi-

mensionen äquivalent zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung ist. Ferner wurde der enge Zusammenhang zwischen der in praktischen Anwendungen sehr erfolgreichen Perfectly-Matched-Layer (PML) Methode und der Polbedingung geklärt. Die vorhandenen Beweise zur Konvergenz der PML-Methode (Lassas/Sommersalo, 1998) konnten auf Probleme mit inhomogenem Außenraum erweitert werden. Es wurde eine Darstellungsformel für Lösungen der Helmholtzgleichung abgeleitet, die sogar für inhomogene Probleme gilt und keine Greenschen Funktionen beinhaltet. Wir konnten Teile der bekannten Sätze von Wilcox und Karp verallgemeinern [2, 1].

Im Berichtszeitraum wurden verschiedene Algorithmen zur Polbedingung in 2D, die den verschiedenen Varianten der Theorie folgen, implementiert und untereinander und mit der PML-Methode verglichen. Die aus der Polbedingungstheorie folgenden Methoden zerfallen in die beiden Hauptklassen Schnittfunktionsmethoden und Reelle-Achsen-Methode. In beiden Klassen lassen sich Algorithmen basierend auf reinen Differentialgleichungen, Integro-Differentialgleichungen und reinen Integralgleichungen ableiten. Alle Methoden wurden einheitlich mit impliziten Runge-Kutta-Verfahren vom Gauß-Radau-Typ implementiert. Die Reelle-Achsen-Methode wurde außerdem noch mit Hilfe des BDF-Verfahrens realisiert. Die bisherigen numerischen Tests zeigen, daß die reinen Differentialgleichungstypen am effektivsten sind. Ihre Effizienz ist etwa gleich der von PML, im Gegensatz zu PML wird aber gleichzeitig eine leicht auswertbare vollständige Lösungsdarstellung im Außenraum sowie das Fernfeld mitgeliefert. Abbildung 2.3 stellt ein idealisiertes technologisches Anwendungsproblem dar. Eine lange optische Faser führt Licht an ein Hindernis heran. Das Licht wird gebeugt und zum Teil zurückreflektiert. Durch die Faser ist der Außenraum inhomogen.

Transparente Randbedingungen für die lineare Schrödingergleichung

Bearbeitet von: L. Zschiedrich, F. Schmidt

Kooperationspartner: A. Schädele (Universität Tübingen); X. Antoine (Université Paul Sabatier, Toulouse, Frankreich); D. Yevick (University of Waterloo, Canada)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Lineare Schrödingergleichungen treten in der Integrierten Optik als Approximation an die Helmholtzgleichung auf. Dabei wird eine Raumrichtungsvariable durch eine „zeitartige“ Variable ersetzt, was zu einer Evolutionsgleichung vom Schrödinger-Typ führt. Ein in einem 2D-Querschnitt gegebenes Feld wird entlang dieser zeitartigen Variablen propagiert. Man spricht daher auch von einer Beam Propagation Methode (BPM). Typischerweise sind die Querschnitte in der Integrierten Optik unbeschränkte Gebiete mit Wellenleiterinhomogenitäten oder Diffusionsprofilen. Entsprechend müssen nach Wahl eines Rechengebietes transparente Randbedingungen konstruiert werden. Diese sind *nicht lokal* im Ort wie auch in der Zeit. Zur Konstruktion von numerisch effizienten transparenten Randbedingungen wurden zwei Ansätze verfolgt, die beide auf einer Semi-Diskretisierung des Außenraumes basieren und die bisherigen Arbeiten [4, 5] verallgemeinern. Zum einen wurde eine neue Variante der PML-Methode entwickelt, bei der keine zusätzliche, künstliche Unbekannte eingeführt werden muß, wie es sonst

üblicherweise geschieht. Es konnte bewiesen werden, daß dieses Verfahren zu vorgegebenem Zeitintervall und unabhängig von der Zeitschrittweite exponentiell schnell mit wachsender Schichtdicke gegen die exakte zeitdiskrete Lösung konvergiert. Das heißt insbesondere, daß der numerische Aufwand pro Zeitschritt nicht mit der Anzahl der Zeitschritte wächst. Zum anderen wurde eine Methode weiterentwickelt, die auf der Polbedingung im Laplaceraum basiert. Dieses Verfahren hat, wie numerische Experimente zeigten, hinsichtlich der Konvergenz, des Aufwandes und der Stabilität vergleichbare Eigenschaften zur PML-Methode. Es wurden erste Schritte hin zu einem Konvergenzbeweis für diese Methode unternommen.

Nichtlineare Schrödingergleichung

Bearbeitet von: T. Hohage, F. Schmidt, P. Deuffhard

Kooperationspartner: E. Voges (Universität Dortmund)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

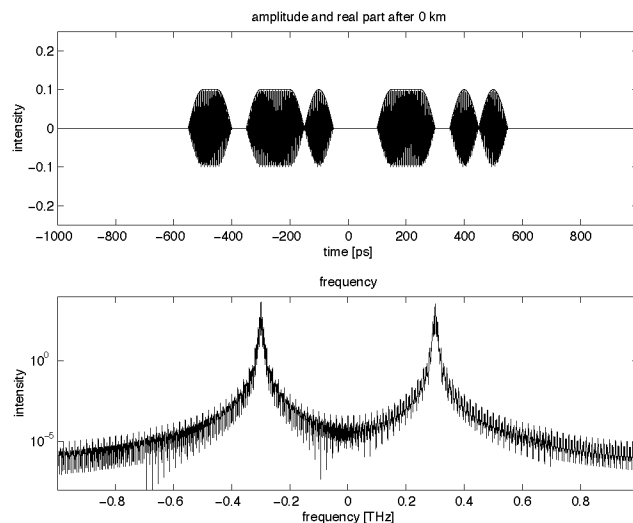


ABBILDUNG 2.4: Optisches Wellenlängenmultiplex-Signal mit 2 Kanälen.

Wird eine große Zahl von Kanälen über eine optische Nachrichtenfaser übertragen, erhöht sich die Leistungsdichte in der Faser so stark, daß nichtlineare Effekte auftreten und beginnen, eine dominierende Rolle zu spielen. Typische nichtlineare Effekte von praktischer Bedeutung sind Selbstphasenmodulation, Kreuzphasenmodulation, Vierwellenmischung und der stimulierte Ramaneffekt. Das einfachste Modell, das solche Effekte modelliert, ist die nichtlineare Schrödingergleichung. Das Ziel der Arbeiten besteht in der Entwicklung schneller und zuverlässiger Methoden zur Lösung der nichtlinearen Schrödingergleichung in dem Parameterbereich, der für optische Anwendungen von Belang ist. Numerisch besteht die Aufgabe darin, ein steifes System gewöhnlicher Differentialgleichungen zu lösen, wobei die Eigenwerte der

Jacobi-Matrix dicht an der imaginären Achse liegen.

Das Standardverfahren in diesem Bereich ist das einfache Split-Step-Verfahren mit Konsistenzordnung 2. Die Schrittweite wird uniform oder nach heuristischen Gesichtspunkten gewählt. Als ersten eigenen Beitrag haben wir basierend auf dieser Methode ein Extrapolationsverfahren mit adaptiver Ordnungs- und Schrittweitensteuerung entwickelt. Insbesondere bei den hier nötigen hohen Genauigkeiten ist dieses Verfahren der Standardmethode deutlich überlegen. Für kompliziertere Nichtlinearitäten, insbesondere bei Berücksichtigung der stimulierten Ramanstreuung, sind Split-Step-Verfahren aufgrund des Verlustes der Symmetrie nicht mehr effektiv. Für solche Probleme haben wir ein spezielles implizites Kollokationsverfahren vom Gaußtyp entwickelt. Es zeigte sich, daß es möglich ist, die in jedem Zeitschritt auftretenden nichtlinearen algebraischen Gleichungen zu lösen, ohne die zugehörige Jacobimatrix explizit aufzustellen. Diese Eigenschaft ist der Schlüssel für die Effizienz der Methode. Die von uns entwickelten Verfahren wurden mit den exponentiellen Integratoren ($\exp 4$) und den Standardintegratoren verglichen. Es stellte sich heraus, daß kein Verfahren in der Lage ist, über alle Problemklassen gleichermaßen gut zu arbeiten. Für die einfache Schrödingergleichung und hohe Genauigkeitsforderungen ist der von uns entwickelte Extrapolationsalgorithmus am effektivsten. Für geringe Genauigkeitsforderungen ist das reduzierte Split-Step Verfahren ohne Extrapolation am besten. Werden sehr hohe Leistungen und Berücksichtigung des Ramaneffekts gefordert, sind die impliziten Kollokationsverfahren vom Gaußtyp am effektivsten. Weiterhin stellte sich heraus, daß die exponentiellen Integratoren in dieser Problemklasse nicht konkurrenzfähig sind, da die Anwendung der Matrixexponentiellen der Jacobimatrix zu teuer ist. Abbildung 2.4 zeigt ein von uns für die Tests verwendetes und für praktische Anwendungen typisches zweikanaliges Signal im Orts- und im Frequenzbereich.

Gründung der Firma JCMWave

Bearbeitet von: F. Schmidt, L. Zschiedrich

Kooperationspartner: R. März (Infineon AG)

Die Firma JCMWave GmbH ist ein Spin-Off aus ZIB und Infineon AG. Sie entstand als Resultat einer mehrjährigen, durch das BMBF geförderten Kooperation im Rahmen der Verbundprojekte zwischen angewandter Mathematik und Industrie. Die innerhalb dieser Kooperation vom ZIB entwickelte Software wurde mit Erfolg beim Industriepartner Infineon AG zum Entwurf optischer Chips eingesetzt. Für eine Reihe technologisch sehr anspruchsvoller Entwurfsaufgaben, z.B. für das Laserdesign, war die vom ZIB entwickelte Software weltweit die einzige, die in der Lage war, die gestellten Aufgaben zu lösen. Das führte von der Anwenderseite her zu dem nachdrücklich vorgebrachten Wunsch, aus dem Forschungscode ein CAD-Werkzeug zu machen, das einen breiten Einsatz in der Entwicklung finden kann und dabei die üblichen Anforderungen an eine moderne Entwicklungsumgebung erfüllt. Da die Entwicklung z. B. von grafischen Oberflächen, die Portierung auf verschiedenen Betriebssysteme, die Erstellung äußerst umfangreicher und anwendungsnaher Materialdatenbanken, soft- und hard-

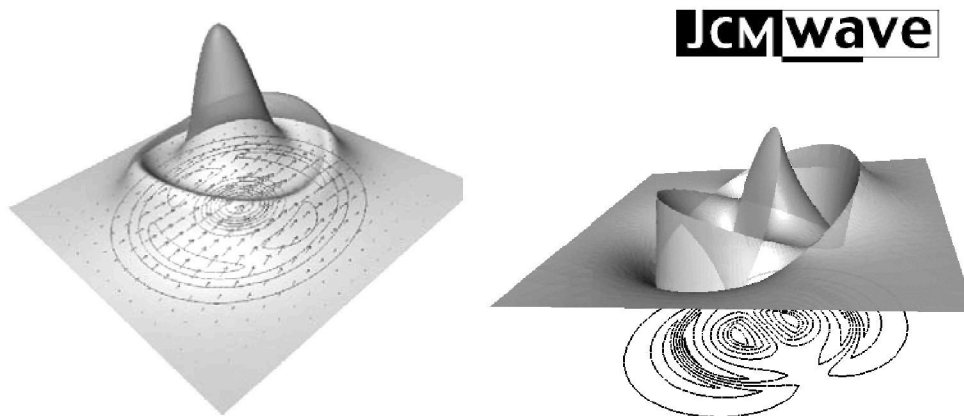


ABBILDUNG 2.5: Transversale (links) und longitudinale (rechts) elektrische Feldstärke eines optischen Koaxialwellenleiters. Mit dem kommerziellen Entwicklungswerkzeug können u.a. solche vektoriellen Wellenleitermoden berechnet werden.

waretechnische Unterstützung von Anwendern etc. nicht im Profil der Arbeitsgruppe liegt, wurde mit Unterstützung von ZIB und Infineon die Firma JCMWave GmbH gegründet und mit diesen Aufgaben betraut. Die Buchstaben JCM des Firmennamens sind die Initialen von James Clerk Maxwell und deuten darauf hin, daß das Profil der Firma die Erstellung kommerzieller Software für jede Art elektromagnetischer Wellenausbreitung ist.

Publikationen

- [1] T. Hohage, F. Schmidt, and L. Zschiedrich, *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition: Convergence of the PML method*, Report 23-01, ZIB, 2001.
- [2] ———, *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition: Theory*, Report 01-01, ZIB, 2001.
- [3] F. Schmidt, *Solution of Interior-Exterior Helmholtz-Type Problems Based on the Pole Condition Concept: Theory and Algorithms*, 2001. Eingreicht als Habilitationsschrift am Fachbereich Mathematik und Informatik, FU Berlin (Okt. 2001).
- [4] F. Schmidt, T. Friese, and D. Yevick, *Transparent boundary conditions for split-step Padé approximations of the one-way Helmholtz equation*, *J. Comp. Phys.* **170** (2001), 696–719.

- [5] D. Yevick, T. Friese, and F. Schmidt, *A Comparison of Transparent Boundary Conditions for the Fresnel Equation*, J. Comput. Phys. **168** (2001), 433–444.

2.2.3 Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle

Dieser neue Schwerpunkt ersetzt den bisherigen Schwerpunkt Prozeßsimulation. Die Umbenennung bringt die Erweiterung der bisher hauptsächlich betrachteten Anwendungsklasse zum Ausdruck und reflektiert die Umorientierung auf neue, interessante Anwendungen aus Biologie und Medizin.

Neben der Frage einer geeigneten Modellierung der zu simulierenden Phänomene steht dabei weiterhin die problemorientierte Modifikation und Erweiterung von Algorithmen und Softwarepaketen zur effizienten und robusten Integration von Differentialgleichungen im Vordergrund. Zunehmende Bedeutung gewinnen dabei die Themenbereiche Sensitivitätsanalyse und Parameteridentifizierung in Differentialgleichungsmodellen.

Weiterentwicklung und Einsatz von linear-impliziten Methoden

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

Kooperationspartner: J.G. Verwer (CWI Amsterdam, Niederlande)

Die Einsatzmöglichkeit linear-impliziter Methoden, wie sie im Programmpaket KAR-DOS implementiert sind, konnte wesentlich erweitert werden durch die Berücksichtigung von Nichtlinearitäten des Gradienten der Lösung in den diffusiven und kapazitiven Termen sowie in den Quelltermen. Damit war es z.B. möglich, den Salztransport in porösen Medien zu untersuchen.

Vor der Einrichtung von Lagerstätten im Erdboden (z.B. Salzstöcke) sind umfangreiche Sicherheitsbeurteilungen notwendig. Ein Aspekt dabei ist die Untersuchung von Grundwasserströmungen, die hochkonzentriert mit Salz angereichert sind. Die hohen Salzkonzentrationen führen zu steilen und bewegten Übergängen von Frischwasser zu Salzlösung. Die nicht isotherme Modellierung berücksichtigt eine Salz-Fluß-Gleichung, eine Salz-Transport-Gleichung und eine Temperatur-Gleichung. Die wesentlichen Schwierigkeiten bestehen darin, daß das System im inkompressiblen Fall vom Index 1 ist und die Transport-Gleichung advektionsdominiert (Peclet-Zahl 10.000) sein kann, während die Fluß- und Temperatur-Gleichungen vom parabolischen Standardtyp mit moderaten konvektiven Termen sind. Die verwendeten Rosenbrock-Verfahren erzielen eine Lösung sowohl bei Index-0- als auch bei Index-1-Problemen ohne Reduktion der Ordnung. Die adaptive Wahl der räumlichen Gitter sorgt für eine stabile Integration des konvektiv-dominanten Terms.

Wir haben insbesondere das Eindringen einer Salzlösung in ein mit Frischwasser gefülltes poröses Medium in zwei und drei Raumdimensionen studiert.

Die Salzlösung wird durch den Fluß langsam fortbewegt und sinkt dabei zu Boden. Die Steifheit der Salzkonzentration ist am Rücken der Front besonders hoch, was durch die

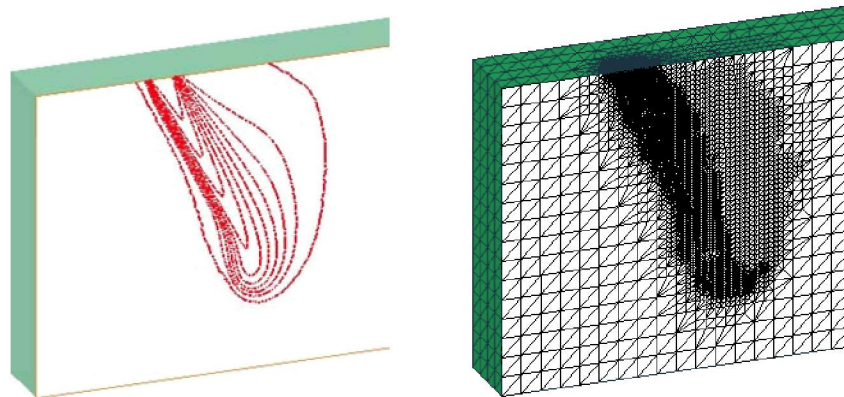


ABBILDUNG 2.6: Dreidimensionaler Transport einer Salzlösung. Isolinien der Salzkonzentration $w = 0.0, 0.01, \dots, 0.09$ in der Ebene $y = 0.28125$ nach vier Stunden und entsprechendes räumliches Gitter.

adaptive Gittersteuerung gut wiedergegeben wird, vgl. Abbildung 2.6.

Bedingt durch den Weggang von J. Lang auf eine C4-Professur an der TH Darmstadt im Oktober 2001, wird der Teilbereich Entwicklung und Einsatz von adaptiven FEM-Methoden in der Zukunft noch stärker anwendungsorientiert sein.

Adaptive FEM-Simulation des Unterkiefers

Bearbeitet von: Jens Lang, Bodo Erdmann, Cornelia Kober, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: R. Sader, H.-F. Zeilhofer (Technische Universität, Klinikum Rechts der Isar, München)

Eine weitere Anwendung fand das Verfahren KARDOS bei linear-elastischen Modellen des menschlichen Unterkiefers. In biomechanischen Untersuchungen stellen Finite-Elemente-Methoden ein weit verbreitetes Hilfsmittel dar. Bei Anwendungen im medizinischen Bereich kommt es insbesondere auf die Gewährleistung der geforderten Rechengenauigkeit an, die bei vielen Verfahren nicht automatisch erbracht wird. In einer Simulation zur Vorhersage der Spannungsverteilung bei verschiedenen Lastfällen am menschlichen Unterkiefer untersuchten wir die Effektivität des adaptiven Codes KARDOS, der gleichermaßen auf die allgemeinere Klasse der nichtlinearen parabolischen Probleme als auch ohne Effizienzverlust auf lineare elliptische Systeme angewendet werden kann. Insbesondere studierten wir die Auswirkungen eines Bisses. Der Knochen wird als inhomogener aber isotroper Werkstoff modelliert und für die Berechnung der Verschiebungen die Gleichungen der linearen Elastizität zugrunde gelegt. Zuverlässig löste die selbst-adaptive Gittersteuerung die steilen Gradienten in der Spannung mit der geforderten Genauigkeit auf. Im Rahmen dieser Arbeiten wurde eine

allgemeine Variante des ILU-Vorkonditionierers zur schnellen Lösung der inhärenten linearen Gleichungssysteme in das Programm integriert.

Heterogene muskuloskelettale Modellierung und Simulation der Tibia

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

Kooperationspartner: G. Duda, N.P. Haas, M. Heller (Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Im Rahmen einer geplanten Kooperation mit Medizinern und Biomechanikern der Charité wurden im Berichtszeitraum erste Vorarbeiten geleistet. Ab dem Jahr 2002 erfolgt die Zusammenarbeit im Rahmen eines Teilprojektes einer von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Klinischen Forschergruppe "Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese". Hauptziele des Projekts sind die heterogene muskuloskelettale Modellierung und effiziente Simulation der Tibia von Schaf und Mensch. Langfristiges Ziel ist die Entwicklung von Softwaremodulen zum Einsatz in einem geplanten Operationsplanungssystem zur Osteosynthese.

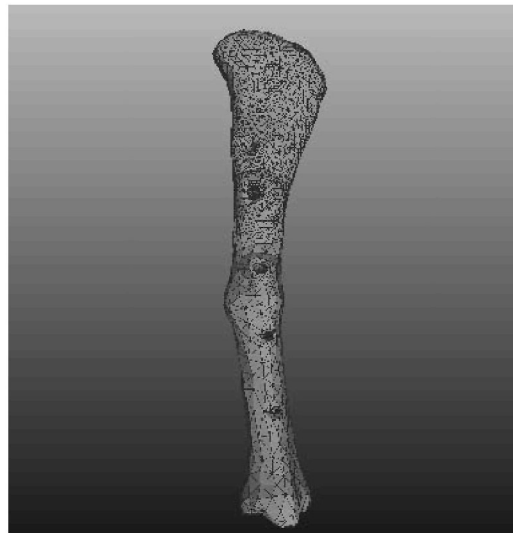


ABBILDUNG 2.7: Muskuloskelettale Modellierung: dynamisches Mehrkörpersystem und FEM-Analyse

Die Arbeiten lassen sich in zwei Themenbereiche gliedern. Ein Bereich ist die mathematische Modellierung des Bewegungsapparates von Mensch und Schaf mit Hilfe der Techniken der inversen und direkten Dynamik. Durch Untersuchungen von typischen Gangarten wie Gehen, Aufstehen oder Treppensteigen sollen die potentiell auf die Tibia wirkenden Kräfte ermittelt und analysiert werden. Der zweite Themenkomplex ist die Entwicklung von effizienten und robusten FEM-Verfahren zur Berechnung der

Spannungsverteilung, insbesondere im Bereich der Bruchstelle, unter Berücksichtigung der verschiedenen Formen der Fixierung. Dabei sollen die typischen Belastungsszenarien, die bei der Ganganalyse ermittelt wurden, als Randbedingungen eingehen.

Die beiden Schwerpunkte sind in Abbildung 2.7 exemplarisch dargestellt. In der linken Abbildung findet sich ein muskuloskelettales Modell des Gangapparates eines Menschen, wie es z.Z. an der Charité verwendet wird. Rechts ist das adaptiv verfeinerte Gitter einer FEM-Rechnung mit dem Verfahren KARDOS dargestellt. Als Testproblem diente eine Schafstibia mit 4 Nagelstellen unter vertikaler Belastung, ohne Berücksichtigung eines Fixateurs.

Angestrebt wird eine Verschmelzung der beiden Simulationsbereiche durch eine geeignete heterogene Modellierung, bei der nur Teile der Tibia mit FEM-Methoden behandelt werden, andere Bereiche sowie der umgebende Bewegungsapparat durch eine Beschreibung mittels Mehrkörperdynamik.

Simulation neuronaler Differentialgleichungsmodelle

Bearbeitet von: Ulrich Nowak, Peter Deuffhard, M. Zöckler

Kooperationspartner: R. Menzel, G. Galizia (Institut für Neurobiologie, FU Berlin); R. Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg, Konrad-Zuse-Fellow)

Im Berichtszeitraum wurde mit vorbereitenden Arbeiten für eine Kooperation mit der AG Menzel im Bereich der Simulation von neuronalen Kompartiment- und Netzwerkmodellen begonnen. Ziel der geplanten Kooperation ist die experimentelle Untersuchung, mathematische Modellierung und Simulation der Duftkodierung im Bienenhirn.

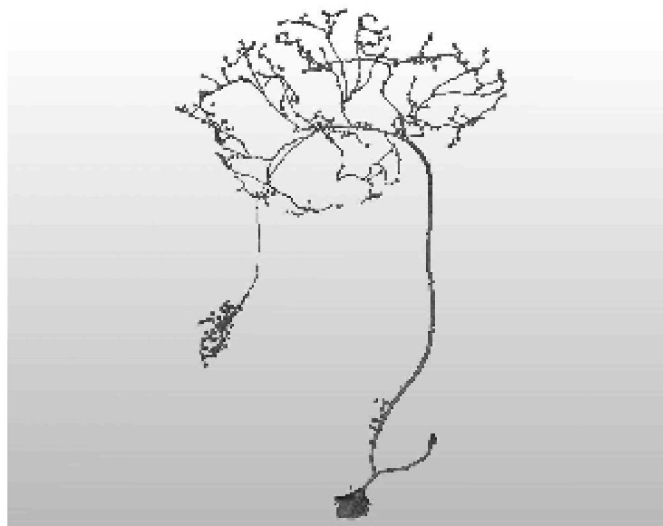


ABBILDUNG 2.8: Rekonstruiertes ACT-Neuron

Im Bereich der Modellbildung soll der Zugang über eine heterogene Differentialgleichungs-/Pulscodierungs-Modellierung erfolgen. Zu koppeln sind demnach Systeme von nichtlinearen Reaktions-Diffusionsgleichungen mit Mesomodellen vom differentiell-algebraischen Typ und Makromodelle in Form von informatischen neuronalen Schaltkreisen. Ausgangspunkt der Arbeiten werden die ACT-Neuronen sein. Um zu untersuchen, inwieweit die räumliche Struktur der Neuronen deren Wirkungsweisen beeinflusst, sind hierarchische Folgen von Kompartimentmodellen zu entwickeln, zu simulieren und zu analysieren. Die Validierung dieser Modelle soll anhand bereits vorliegender Daten der AG Menzel bzw. mit Hilfe speziell dafür ausgelegter, neuer Experimente erfolgen. Zur Illustration ist in Abbildung 2.8 ein 3D-rekonstruiertes ACT-Neuron dargestellt.

Diese Arbeiten sollen in Teilprojekt C3 im Rahmen des vorbegutachteten Sonderforschungsbereichs "Effiziente Modellierung und Simulation heterogen strukturierter Prozesse" fortgeführt werden.

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 (DFG))

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten an einer numerischen Simulations- und Parameteridentifizierungsumgebung für den in Halle entwickelten speziellen Kombinationsreaktor fortgeführt. Es wurden verschiedene Modelle zur Beschreibung einer gekühlten bzw. beheizten Reaktorwand erstellt und untersucht. Des Weiteren wurde die Gesamtstruktur des technisch komplexen Kühl- bzw. Heizsystems modelliert. Aufgrund der unterschiedlichen Verschaltungsmöglichkeiten ergeben sich für die numerische Simulation Jacobimatrizen mit sehr irregulären Besetzungsstrukturen. Dies erzwingt den Einsatz von allgemeinen Sparse-Matrix-Techniken, direkt und iterativ, im Rahmen des Integrators LIMEX. Daher wurden auch für diese LIMEX-Varianten eine interne numerische Differentiation zur effizienten Sensitivitätsberechnung implementiert. Neu ist die Möglichkeit, die Sensitivitätsberechnungen bereits auf niedrigerer Extrapolationsstufe abzurechnen, wenn vorgegebene Genauigkeitsschranken erreicht werden. Dank der erfolgten Modellerweiterungen konnten umfangreiche Simulationsstudien für einen im Aufbau befindlichen Reaktor, mit bis zu 24 Modulen und 3 Kühlkreisläufen, durchgeführt werden. Exemplarisch ist ein Teil der Anlage in Abbildung 2.9 dargestellt.

Für einen sehr einfachen Testfall (1 Modul, nur Wärmeleitung) wurden für verschiedene Auslegungsvarianten, wie z.B. Art der Schüttung, Rohrdurchmesser und Einströmgeschwindigkeit, eine Parameteridentifizierung verschiedener Wärmeübergangsparmeten vorgenommen. Die Resultate liegen innerhalb der aus der Literatur

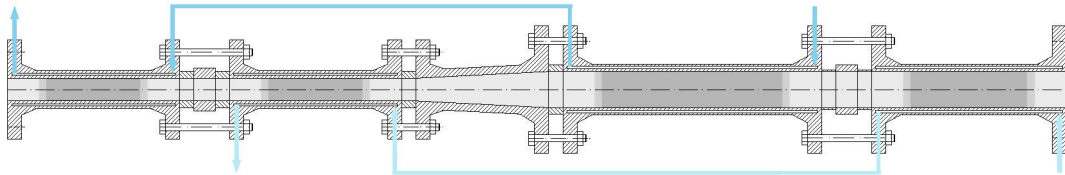


ABBILDUNG 2.9: Beispiel einer typischen Reaktorstruktur

bekanntem Bereiche. Offen ist noch, wie die vorhandene Abhängigkeit von gewissen Auslegungsparametern geeignet zu modellieren ist.

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 (DFG))

Im Berichtszeitraum konnten die im Vorjahr entwickelten Modelle und Programme weiter ausgebaut und zur Simulation der Aerosolentstehung und -wachstums in einer Reihe von technisch wichtigen Anwendungen genutzt werden. Insbesondere kann jetzt auch der Einfluß der stofflichen und thermischen Dispersion berücksichtigt werden. Das innerhalb der Kooperation entstandene Programmsystem **AerCoDe** dient inzwischen zur routinemässigen Simulation des Verhaltens von Aerosolen in unterschiedlichsten technischen Anlagen.

Die theoretischen Grundlagen der Modellierung und ihre Anwendung wurden ausführlich dargestellt in zwei zur Publikation angenommenen Veröffentlichungen. Im Vordergrund standen hierbei die Systeme $\text{HCl-H}_2\text{O}$ und $\text{H}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$, letzteres ist durch das Auftreten extremer Übersättigungen besonders anspruchsvoll.

Weiterhin wurde die mehrdimensionale Modellierung mit Hilfe des Finite-Element-Programms KARDOS auf Grundlage von Populationsbilanzen vervollständigt. Dies ermöglichte die Untersuchung von homogener Keimbildung und Koagulation. Die Simulation des Systems $\text{HCl-H}_2\text{O}$ bestätigte bereits die experimentell begründete Vermutung, daß unter normalen Bedingungen keine wesentliche Verbreiterung der Verteilung der Größe der Aerosoltröpfchen zu erwarten ist.

Simulation von mechanisch und thermisch beanspruchten Bauteilen (Rainer Schamel, Ulrich Nowak; Kooperationspartner: Manfred Korzen, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung - BAM, Labor Brandingenieurwesen, I.O. Neves, Instituto Superior Tecnico, Lisbon, Portugal)

Ein Schwerpunkt der Arbeiten war die Modellierung und Simulation der Verschiebung von Stützen aus Stahl im Zug-Druck-Versuch unter Berücksichtigung eines vorgegebenen Temperaturfeldes. Zur Simulation und Sensitivitätsanalyse wird das Verfahren LIMEX eingesetzt.

In einem zweiten Schwerpunkt der Arbeiten soll die Wechselwirkung von Bauteil und umgebender Struktur untersucht werden. Dazu wurde das Dataloggersystem des Stützenprüfens der BAM per Client-Server-Architektur an das FEM-Programmsystem CASTEM2000 gekoppelt. Simulierte Reaktionen eines Stahlskelettbauwerkes sollen während des Brandversuches als äußere Randbedingungen auf den Prüfkörper aufgebracht werden.

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

Im Rahmen eines Forschungs- und Entwicklungsvertrags mit dem GeoForschungsZentrum Potsdam wurden die Arbeiten zur effizienten und robusten Satellitenbahnrechnung fortgeführt und im Berichtszeitraum (zunächst) zum Abschluß gebracht.

Bedingt durch die anwendungstechnischen Rahmenbedingungen konzentrierten sich die Arbeiten auf die Analyse und Weiterentwicklung des Integrationsverfahrens CO-WELL innerhalb der GFZ-Softwarepakets EPOSOC. Dabei handelt es sich um ein symmetrisches, 2-fach summiertes Cowell-Verfahren der Ordnung 8 in Ordinatenform, das mit konstanter Schrittweite arbeitet. Es wurde eine Familie von Cowell-Verfahren entwickelt, in denen neben der festen Schrittweite h auch die feste Ordnung $p \in \{6, 8, 10, 12, 14\}$ gewählt werden kann. Zur Abschätzung des globalen Diskretisierungsfehlers wurde eine globale $(h, h/2)$ -Schrittweitereinbettung bzw. $(p, p + 2)$ -Ordnungseinbettung realisiert. Beide Fehlerschätzer arbeiten äußerst robust.

Die Implementierung eines lokalen Fehlerschätzers zeigte, daß für die interessierende Problemklasse eine Verfahrensimplementierung mit lokal variabler Schrittweite bzw. Ordnung nur zu einem erhöhten Overhead führt. Bei den für die Anwendung typischen stringenten Genauigkeitsanforderungen zeigten sich dagegen deutliche Effizienzgewinne durch die Erhöhung der Verfahrensordnung. Durch eine alternative Prädiktor/Korrektor-Strategie konnte eine weitere Beschleunigung der Rechnungen erreicht werden.

Dynamische Dimensionsreduktion zur effizienten Simulation von CVD-Reaktoren (Konstantin Afanasiev, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard; Kooperationspartner: Ulrich Maas, Dietmar Schmidt, Jörg Bauer, ITV Universität Stuttgart, Vivek Kumar, Gunter Brenner, Franz Durst, LSTM Universität Erlangen-Nürnberg, Michael Heuken, AIXTRON AG Aachen; Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF))

In dem Vorhaben sollen neuartige Algorithmen zur numerischen Simulation von CVD-Reaktoren entwickelt werden (CVD = Chemical Vapor Deposition, dt.: Chemische Dampfabscheidung). Die Modellierung derartiger Prozesse führt auf äußerst komplexe Systeme von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen von Typ Konvektion-Diffusion-Strömung mit chemischen Reaktionen. Ziel ist es, die gemeinsam von der Stuttgarter und der Berliner Arbeitsgruppe in den letzten Jahren entwickelten Metho-

den der dynamischen Dimensionsreduktion in enger Kopplung mit dem Strömungscode FASTEST aus Erlangen weiterzuentwickeln und die Tauglichkeit für industrie-relevante Probleme in enger Kooperation mit der Firma AIXTRON AG (Aachen) zu untersuchen.

Im Berichtszeitraum wurden zunächst Ansätze zur dynamischen Dimensionsreduktion analysiert, welche die Kopplung von chemischer Reaktion und Transport berücksichtigen. Anknüpfend an die Arbeiten von DEUFLHARD/HEROTH wurden für den Fall gewöhnlicher Differentialgleichungen einige Testversionen eines Algorithmus zur dynamischen Dimensionsreduktion auf der Basis der QR- bzw. Arnoldi-Verfahren implementiert und an ersten, kleinen Beispielen erfolgreich getestet.

Publikationen

- [1] J. Lang, B. Erdmann: *Adaptive Linearly Implicit Methods for Heat and Mass Transfer Problems*, in: A.V. Wouwer, P. Saucez, W.E. Schiesser (eds.), *Adaptive Methods of Lines*, 295-316 (CRC Press, 2001)
- [2] J. Lang, B. Erdmann: *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*, in: G. de Vahl Davis and E. Leonardi (eds.), *CHT'01: Advances in Computational Heat Transfer*, 1001–1008 (Begell House Inc., New York 2001)
- [3] J. Lang, J. Verwer: *ROS3P - An Accurate Third-Order Rosenbrock Solver Designed for Parabolic Problems*, *BIT* 41, 730–737 (2001)
- [4] B. Erdmann, C. Kober, J. Lang, P. Deuffhard, H.-F. Zeilhofer, R. Sader: *Efficient and Reliable Finite Element Methods for Simulation of the Human Mandible*, Report 01-14, ZIB, 2001.
- [5] J. Lang, B. Erdmann: *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*, (enlarged version) to appear in *Numerical Heat Transfer*, 2001.
- [6] R. Ehrig, O. Ofenloch, K. Schaber, P. Deuffhard: *Modelling and simulation of Aerosol Formation by Heterogeneous Nucleation in Gas-Liquid Contact Devices*. *Chem. Eng. Sci.* 57(7), 1151–1163 (2002)
- [7] K. Schaber, J. Körber, O. Ofenloch, R. Ehrig, P. Deuffhard: *Aerosol Formation in Gas-Liquid Contact Devices – Nucleation, Growth and Particle Dynamics*. Angenommen zur Publikation in *Chem. Eng. Sci.*
- [8] P. Deuffhard, F. Bornemann, *Numerische Mathematik II, Gewöhnliche Differentialgleichungen*, 2. vollständig überarbeitete und erweiterte Auflage, Walter de Gruyter, Berlin 2002

2.2.4 Computergestützte Therapieplanung

In diesem Schwerpunkt werden Arbeitsumgebungen entwickelt, mit denen sich komplexe Therapien individuell planen und optimieren lassen. Als Software-Basis dient das System AMIRA, das bereits vielfältige Funktionen zur 3D-Bildanalyse, Geometrierekonstruktion, Gittergenerierung und 3D-Visualisierung bietet.

Im Zentrum der Aktivitäten stand die Entwicklung eines 3D-Planungssystems zur präoperativen Simulation knochen- und weichgewebeverlagernder Eingriffe für die *Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie* (MGK). Die Verfahren erreichten im Berichtszeitraum einen Reifegrad, der es erlaubte, bereits mehrere klinische Fälle in Zusammenarbeit mit Ärzten zu planen. Eine Weltneuheit ist die Durchführung von Mimiksimulationen auf Basis eines anatomisch korrekten Modells.

Einen zweiten Schwerpunkt bildete weiterhin die *regionale Hyperthermie* – ein Verfahren der Krebstherapie, bei dem Tumorgewebe durch kontrollierte Radiowelleneinstrahlung auf Temperaturen von 42 bis 44°C erwärmt wird. Hier konzentrierten sich die Arbeiten auf die schwierige nichtinvasive Temperaturbestimmung, welche als Grundlage für einen Regelkreis zur Steuerung der Hyperthermie-Applikatoren dienen soll.

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

Bearbeitet von:

Peter Deuffhard, Stefan Zachow, Evgeny Gladilin, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner:

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

Die Methoden zur 3D-Planung knochenverlagernder Eingriffe in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie (MKG) wurden deutlich weiterentwickelt [11, 12], so daß sich eine komplette Planung mittlerweile an einem Arbeitstag durchführen läßt, d.h. Segmentierung der tomographischen Bilddaten und Generierung eines anatomisch korrekten Planungsmodells, Knochenschnittplanung, Knochenumstellung und Simulation der daraus resultierenden Weichgewebeanordnung. In Kooperation mit den Münchener Chirurgen wurden entsprechende Planungen in vier klinischen Fällen erfolgreich vorgenommen. Eine erste Überprüfung der Simulationsergebnisse für die lineare und nichtlineare Berechnung der Weichgewebedeformation konnte anhand postoperativer Profilbilder erfolgen [6, 7], wobei sich qualitativ bereits eine sehr gute Übereinstimmung mit dem tatsächlichen Resultat zeigte (Abbildung 2.10). Eine quantitative Überprüfung kann durch den Vergleich mit der realen dreidimensionalen Weichgewebeanordnung, z.B. anhand von postoperativen tomographischen Daten, erfolgen; sie wird durchgeführt, sobald die entsprechenden Daten vorliegen.

Neben der statischen Weichgewebesituation stellt die resultierende Gesichtsmimik ein wichtiges Kriterium im Hinblick auf die optimale ästhetische Rehabilitation dar.

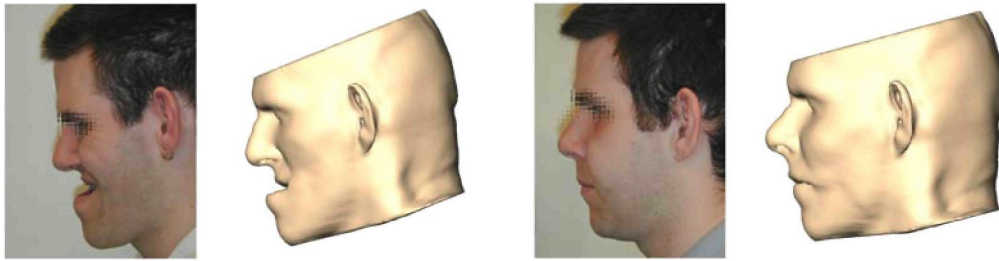


ABBILDUNG 2.10: Vergleich: links) präoperative Situation und Modell, rechts) postoperatives Ergebnis und Simulation.

Die Entwicklung von Methoden zur Simulation von Muskelkontraktionen war daher ein weiterer Schwerpunkt [8, 9, 10] der Arbeiten. Muskeln werden dabei nicht als lineare Verbindungen zwischen Muskelansatzpunkten modelliert, sondern in ihrer vollständigen, dreidimensionalen Geometrie, wie sie den Bilddaten zu entnehmen ist. Für die makroskopische Modellierung ist dabei lediglich von Bedeutung, daß Zugkräfte in Muskeln entlang der Tangenten zu den Muskelfasern gerichtet sind. In dem von uns verwendeten Modell wird der Verlauf der Muskelfasern anhand der Informationen über Form und Ansatzflächen eines Muskels bestimmt. Diese werden aus dem patientenspezifischen Modell der inneren, gewebetrennenden Grenzflächen gewonnen. In einer ersten Studie wurden in der Mimiksimulation lediglich die zwei Gesichtsmuskeln berücksichtigt, die hauptauschlaggebend für das Lächeln sind (Abbildung 2.11). In unserer weiteren Arbeit konzentrieren wir uns auf die Erstellung eines anatomisch korrekten Modells der gesamten mimischen Muskulatur und der Simulation unterschiedlicher Gesichtsausdrücke. Die Ergebnisse sollen dann auf individuelle Patientenanatomien übertragen werden. Sie lassen sich sowohl für die Planungsbewertung als auch zur Patientenaufklärung nutzen.

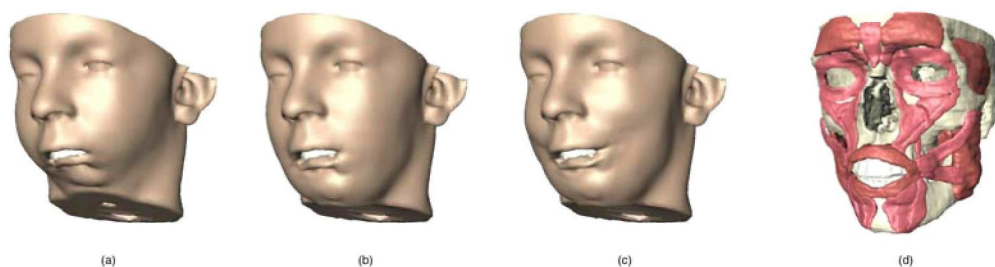


ABBILDUNG 2.11: a) präoperative Situation, b) Simulation des postoperativen Erscheinungsbildes, c) muskelbasierte Simulation eines Lächelns, d) 3D-Modell der Gesichtsmuskulatur.

Kombiniertes MR-Hyperthermie-System in Berlin-Buch

Bearbeitet von:

Hans Lamecker, Martin Seebaß, Martin Weiser, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner:

Johanna Gellermann, Peter Wust, Roland Felix (Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin); Peter Schlag (Charité, Campus Berlin-Buch, HU Berlin)

Förderung: Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

Im Berichtszeitraum wurde in der Robert-Rössle-Klinik in Berlin-Buch ein neues Hyperthermiegerät installiert, in dem ein Magnetresonanz-Tomograph (MRT) mit einer Feldstärke von 1.5 Tesla und ein Hyperthermie-Applikator vom Typ *Sigma-Eye* (siehe Jahresbericht 1998) kombiniert sind (Abbildung 2.12).

Mit dem neuen Gerät wird es möglich, zeitgleich mit der Behandlung eine MRT-Bildgebung durchzuführen. Dies erlaubt eine Kontrolle der Patientenlagerung; das Hauptziel ist aber, die Temperaturverteilung im Patienten nichtinvasiv mittels spezieller Bildgebungs-Sequenzen zu bestimmen. In der Zukunft soll dies für eine on-line-Kontrolle der Behandlung genutzt werden.



ABBILDUNG 2.12: Kombiniertes MR-Hyperthermie-System in der Robert-Rössle-Klinik in Berlin-Buch.

Als aussichtsreichstes Verfahren zur nichtinvasiven Temperaturmessung hat sich die PRF-Methode herausgestellt, bei der man sich die Tatsache zunutze macht, daß sich die Protonen-Resonanzfrequenz (PRF) mit der Temperatur ändert. Dies äußert sich als Änderung der Phase des gemessenen Signals. Mit der PRF-Methode wird keine absolute Temperatur gemessen, sondern die Temperaturdifferenz gegenüber dem Zustand vor der Behandlung.

Da die Resonanzfrequenz auch von der Magnetfeldstärke abhängt, diese aber über die Dauer der Behandlung (1-2 Stunden) driftet, wird eine Temperaturänderung vorgetauscht. Es wurde ein Modul zur *Driftkorrektur* entwickelt und in das Hyperthermie-Planungssystem integriert. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, daß die Temperatur im Wasserbolus des Hyperthermie-Applikators nur schwach in Ort und Zeit variiert und mit einem Sensor gemessen werden kann. Der scheinbare Temperaturverlauf im Bolus wird durch eine glatte Funktion (ein Polynom maximal dritten Grades) approximiert. Aus dieser Funktion sowie dem Temperaturmeßwert für den Bolus ergibt sich die Korrektur der gemessenen Verteilung.

Eine weitere Schwierigkeit bei der Temperaturmessung ist, daß zusätzlich zur Temperatur auch die Durchblutung des Gewebes in die Meßwerte eingeht. Für eine zuverlässige Bestimmung der Temperatur muß daher auf Methoden der Parameteridentifizierung zurückgegriffen werden. Damit läßt sich zudem die individuell stark variierende Durchblutung ermitteln, was eine Voraussetzung für die Online-Nachoptimierung ist. Erste Voruntersuchungen deuten darauf hin, daß beim gegenwärtigen Stand der Meßtechnik Temperatur und Durchblutung im allgemeinen jedoch nicht eindeutig bestimmbar sind, d.h. weitere meßtechnisch erfaßbare Parameter einfließen müssen.

Mit dem neuen Gerät wurde eine Reihe von Experimenten an einem *3D-Phantom* durchgeführt, in das ein Plastik-Skelett integriert ist, das von den Oberschenkelknochen bis zur Lendenwirbelsäule reicht. Durch das Skelett entsteht eine stark inhomogene Feldverteilung im Innern des Phantoms mit charakteristischen „hot spots“. Die Phantomexperimente dienen einerseits der Kalibrierung der PRF-Methode als Temperaturmeßverfahren. Zum Vergleich werden Daten herangezogen, die mit „konventionellen“ Meßsonden entlang von Kathetern gewonnen wurden. Andererseits erlauben die Experimente eine Überprüfung der Simulationsrechnungen. Für das Phantom wurde eine Planung wie für einen Patienten durchgeführt. Antenneneinstellungen, die nach der Simulation zu einer Reduktion der hot spots führen, wurden im Experiment überprüft. Da das Phantom nicht perfundiert ist, würde sich eine stationäre Temperaturverteilung erst nach vielen Stunden einstellen. Deshalb wurde zum Vergleich mit den Simulationsrechnungen die transiente Temperaturverteilung herangezogen. Die Simulationen wurden dabei mit dem am ZIB entwickelten Programmpaket KARDOS durchgeführt.

Eine erste Analyse der Ergebnisse zeigt eine qualitative Übereinstimmung zwischen Messungen und Simulation. Eine genaue quantitative Analyse soll auf Basis einer Reihe weiterer Experimente geschehen.

Eine Fortführung der Förderung bezüglich Modellierung der Wärmeverteilung und der optimalen Steuerung der Antennen wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums „Mathematics for key technologies“ erfolgen (Teilprojekt A1).

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Intraoperative Navigation und Operationsplanung für die Leberchirurgie (Hans Lamecker, Martin Seebaß, Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege, Peter Deuflhard; Kooperation: Thomas Lange, Sebastian Eulenstein, Peter Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch, HU Berlin)

Ziel dieses Projektes ist es, ein integriertes System für die computergestützte intraoperative Navigation bei Interventionen an der Leber zu entwickeln. Dieses soll die präoperative Planung, das räumliche Verfolgen (Tracking) und Kalibrieren von chirurgischen Instrumenten, Ultraschall-Kopf und Videokamera, die Registrierung von prä- und intraoperativen Daten sowie die gemeinsame Visualisierung aller relevanten Daten umfassen.

Die am ZIB entwickelte Software AMIRA bildet die Basis eines solchen Systems. Zur Segmentierung der CT-Daten in der prä-operativen Planung wurde ein dreidimensionales statistisches Modell der Leber aufgebaut und analysiert (Abbildung 2.13); die Extraktion des Gefäßbaumes geschieht mit Hilfe eines topologie-erhaltenden Thinning-Algorithmus (vgl. „Modellbasierte Segmentierung“ und „Mikrogefäßanalyse“, Seite 52).

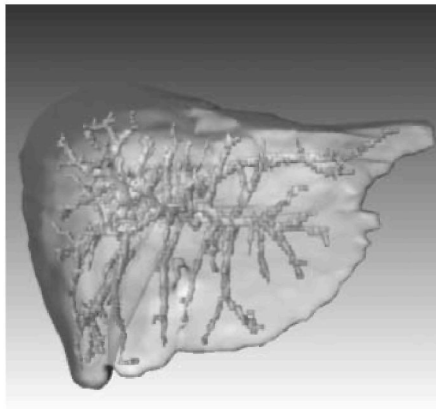


ABBILDUNG 2.13: 3D-Modell der Leber mit portalvenösen Gefäßen.

Computergestützte individuelle und beanspruchungsgerechte Frakturversorgung (Stefan Zachow, Hans-Christian Hege, Ulrich Nowak, Peter Deuflhard; Kooperation: Norbert P. Haas, Georg Duda, Charité – Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin, Klinik für Unfall- und Wiederherstellungschirurgie)

Ziel dieses in Kooperation mit Medizinern und Biomechanikern durchgeführten Projektes ist es, eine individuelle und beanspruchungsgerechte Knochenfrakturversorgung (Osteosynthese) zu erreichen. Fehl- und Überbelastungen können zu Verzögerungen bei der Knochenheilung führen. Zukünftig sollen daher bereits im Prozeß der

Operationsplanung die sich bei unterschiedlichen Bewegungsabläufen der Patienten (wie Stehen, Laufen, Treppen steigen usw.) ergebenden Muskel- und Gelenkkräfte berücksichtigt werden, wie auch die individuelle Knochenqualität und die mechanischen Eigenschaften des Osteosynthesystems. Hierzu soll auf Basis von am ZIB entwickelten numerischen Modulen zur Belastungsanalyse und der Software AMIRA ein computerunterstütztes Planungssystem entwickelt werden.

In ersten Arbeiten wurde ein CT-Datensatz zweier Schafstibiae (Schienbeine) segmentiert und in Tetraedergitter überführt. Des Weiteren wurden für mechanische Analysen, die den CT-Daten zugrunde liegenden Hounsfieldwerte auf das Gitter übertragen, um Aussagen über die Knochendichte treffen und diese in einer Simulation geeignet berücksichtigen zu können (Abbildung 2.14).

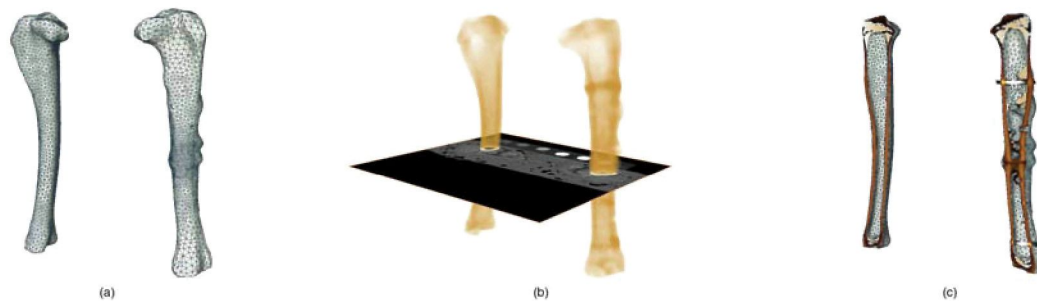


ABBILDUNG 2.14: Modell zweier Schafstibiae: a) Gittermodell mit adaptiv aufgelöster Frakturzone, b) Darstellung der Röntgenabsorptionsdichte, c) Schnitt durch die Tibiae mit überlagelter Darstellung der Knochendichte.

In einem weiteren Schritt soll ein komplettes, aus CT-Daten gewonnenes Schafmodell erstellt werden, in dem Knochen, Weichgewebe und Muskeln differenziert vorliegen – als Basis für die biomechanischen Untersuchungen am Tier.

Ab 2002 werden die Arbeiten im Rahmen der DFG-geförderten klinischen Forschergruppe „Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese“ weitergeführt. Die zugehörige mathematische Modellierung und Simulation wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums „Mathematics for key technologies“ in Kooperation mit R. Kornhuber und R. Krause (FU) behandelt (Teilprojekt A2).

Individuelle anisotrope und inhomogene Modellierung für den menschlichen Unterkiefer (Cornelia Kober, Stefan Zachow, Steffen Prohaska; Kooperation: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Klinik und Poliklinik für MKG-Chirurgie, TU München, Klinikum rechts der Isar), Christina Dorow, Martin Geiger, Natasa Krstin, Klaus-Werner Sander (Universitätsklinikum Ulm, Poliklinik für Kieferorthopädie))

Innere Struktur und äußere Gestalt knöcherner Organe werden unter anderem von den mechanischen Belastungen bestimmt [5]. Im Fall des menschlichen Unterkiefers ist

dies relevant für das Design zahnärztlicher Implantate, die Modellierung von Prothesen bis hin zur Planung und Optimierung komplexer kraniofazialer Operationen [12].

Allgemein erfordert die strukturmechanische Simulation eine Rekonstruktion der individuellen Geometrie, eine Beschreibung der „äußeren“ Einwirkungen auf den Kiefer sowie eine Formulierung des Materialgesetzes des Knochens.

Computertomographische Datensätze liefern eine räumliche Verteilung der Röntgendichte. In Zusammenarbeit mit Mitarbeitern des Universitätsklinikums Ulm wurde ein getrockneter humaner Unterkiefer mit hoher Auflösung gescannt und mit der am ZIB entwickelten Software AMIRA [1] rekonstruiert, siehe Abbildung 2.15. Der Vergleich des realen Präparats mit dem AMIRA-Modell ergab eine Genauigkeit von ca. 0,5 mm.

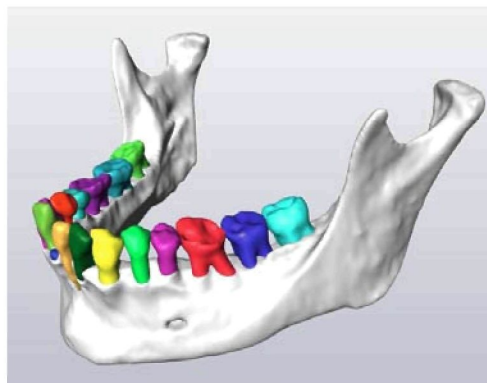


ABBILDUNG 2.15: Hochaufgelöste 3D-Rekonstruktion eines Kiefers.

Ein weiterer Schwerpunkt des Projekts war eine geeignete individuelle Beschreibung des Materialgesetzes für den Unterkieferknochen. Mit Hilfe der Dichteinformation aus den CT-Daten können die wesentlichen Bestandteile des Knochens, Spongiosa und Kortikalis, voneinander getrennt werden. Die richtungsabhängige Information der Materialanisotropie ist verloren. Gemäß [2, 4] gehen wir von orthotroper Materialsymmetrie für den kortikalen Knochen bzw. von transversal isotroper Isotropie für die Spongiosa aus. Für die Generierung der Trajektorien des elastischen Tensors wurde der Kiefer auf sein „Skelett“ reduziert, siehe [3]. Danach weisen wir dem Kiefer eine Materialverteilung aus experimentellen Daten aus der Literatur zu [2]. In einem nächsten Schritt wird diese mit den – individuellen – Hounsfield-Werten aus dem CT-Datensatz skaliert und zur Vermeidung von Unstetigkeiten innerhalb der Kortikalis oder Spongiosa geglättet. Die Elastizitätsmodule in axialer, tangentialer und radialer Richtung stehen i.a. in einem Verhältnis von ca. 10:13:19 zueinander, siehe [2]. Diese Abweichung von nahezu 100 % schlägt sich auch in den Simulationsergebnissen nieder.

Publikationen

- [1] *Amira 2.3 – User’s Guide and Reference Manual*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und Indeed - Visual Concepts, 412 S., Berlin, 2001

- [2] R.B. Ashman, W.C. Van Buskirk: *The elastic properties of a human mandible*, *Adv. Dent. Res.* 1, pp. 64–67, 1987.
- [3] I. Bitter, M. Sato, M. Bender, K.T. McDonald, A. Kaufman, M. Wan: *CEASAR: Accurate and Robust Algorithm for Extraction a Smooth Centerline*, Proc. IEEE Visualization, pp. 45–52, 2000.
- [4] A.M. O’Mahony, J.L. Williams, J.K. Katz, P. Spencer: *Anisotropic properties of cancellous bone from a human edentulous mandible*, *Clin. Oral Implants Res.*, Vol. 11, Oct. 2000.
- [5] J. Wolff: *Das Gesetz der Transformation der Knochen*, Hirschwald, Berlin, 1892.
- [6] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Validation of a Linear Elastic Model for Soft Tissue Prediction in Craniofacial Surgery*, SPIE Medical Imaging, San Diego, USA, 2001, pp. 27–35
- [7] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Validierung eines linear elastischen Modells für die Weichgewebesimulation in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie*, Bildverarbeitung für die Medizin (BVM), Lübeck, Germany, 2001, pp. 57–61.
- [8] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Virtual Fibers: A Robust Approach for Muscle Simulation*, IX. Mediterranean Conference on Medical and Biological Engineering and Computing (MEDICON), Pula, Croatia, 2001, pp. 961–964
- [9] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *FE-based heuristic approach for the estimation of person-specific facial mimics*, 5-th Int. Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, Rome, Italy, 2001
- [10] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Towards a Realistic Simulation of Individual Facial Mimics*, Proc. Vision, Modeling and Visualisation (VMV), Stuttgart, Germany, 2001, pp. 129–133
- [11] S. Zachow, E. Gladilin, H.-C. Hege and P. Deuffhard: *3D Osteotomieplanung in der MKG-Chirurgie unter Berücksichtigung der räumlichen Weichgewebeanordnung*, Lecture Notes in Informatics, Rechner- und sensorgestützte Chirurgie, GI Proc. zur SFB 414 Tagung, Heidelberg, Germany, 2001, pp. 217–226
- [12] S. Zachow, E. Gladilin, H.-F. Zeilhofer and R. Sader: *Improved 3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery*, in: Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention MICCAI 2001, Utrecht, The Netherlands, Oct. 2001, pp. 473–481, Springer.

2.2.5 Biomedizinische Bildverarbeitung

Im Zentrum der Aktivitäten stand die Geometrie-Rekonstruktion aus Bildstapeln mit den Vorverarbeitungsschritten Bildverbesserung, Bildregistrierung und Bildsegmentierung.

Blinde und nicht-blinde 3D-Bildentfaltung

Bearbeitet von: Detlev Stalling

Kooperationspartner: Rainer Heintzmann (Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie, Göttingen)

Ein wichtiges bildgebendes Verfahren im Bereich der Biowissenschaften ist die sogenannte 3D-Epifluoreszenz-Mikroskopie. Dabei werden Schnittbilder durch ein speziell gefärbtes fluoreszierendes Präparat angefertigt, indem die Fokusebene des Mikroskops schrittweise durch das Objekt gefahren wird. Allerdings enthalten die Schnittbilder nicht nur Strukturen aus der Fokusebene, sondern auch Licht aus den darüber- bzw. darunterliegenden unscharf abgebildeten Schichten. Dieser Effekt tritt ebenfalls, wenn auch in stark reduzierter Form, bei einem konfokalen Laser-Scanning-Mikroskop auf, bei dem jeweils nur ein Punkt in der Fokusebene durch eine Lochblende scharf abgebildet wird. Die Bildentstehung läßt sich durch eine Faltung der eigentlichen Objektfunktion mit der sogenannten Point-Spread-Funktion (PSF) des Mikroskops beschreiben. Mit Hilfe von Entfaltungstechniken lassen sich Beiträge aus unscharf abgebildeten Schichten „wegrechnen“, so daß sich eine zum Teil erheblich verbesserte Bildqualität ergibt (Abbildung 2.16).

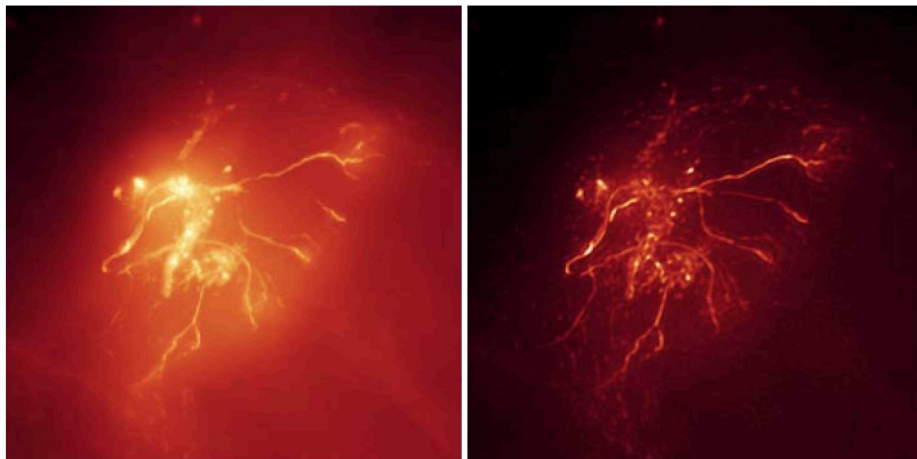


ABBILDUNG 2.16: Maximum-Intensity-Projektion des gefärbten Alpha-Neurons aus dem optischen Lobus im Gehirn einer Biene, links im Original, rechts nach blinder 3D-Bildentfaltung.

Zunächst wurden verschiedene Entfaltungsalgorithmen evaluiert. Dabei stellten sich Maximum-Likelihood-Methoden für ein breites Spektrum biomedizinischer Bilddaten

als am besten geeignet heraus. Zur numerischen Lösung wurde ein auf Richardson-Lucy basierender iterativer Ansatz gewählt. Neben einer konventionellen Maximum-Likelihood-Methode, bei der die PSF vorgegeben werden muß, wurde ein blindes Verfahren entwickelt, bei dem die PSF wie auch die Objektfunktion aus den Bilddaten berechnet werden. Um diesen Prozess stabil zu halten, wurden neuartige Constraints erarbeitet, die sich auf die Form der PSF im Fourierraum beziehen. Die Konvergenz der Algorithmen konnte durch eine spezielle Überrelaxationstechnik deutlich verbessert werden. Sowohl das blinde wie auch das nicht-blinde Verfahren unterstützen konventionelle 3D-Mikroskopie wie auch konfokale Laser-Scanning-Mikroskopie. Die Algorithmen wurden zusammen mit Zusatzmodulen, die u.a. die Extraktion einer PSF aus experimentellen Daten erlauben, in das 3D-Visualisierungssystem AMIRA integriert und dokumentiert [3].

Modellbasierte Segmentierung

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

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

Förderung: Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

Die Segmentierung dreidimensionaler medizinischer Bilddaten ist zur Zeit oft mit einem hohen Anteil an Benutzer-Interaktion verbunden und erfordert Expertenwissen über die zu segmentierenden Strukturen. Eine Schwierigkeit liegt darin, daß die Bilddaten im allgemeinen verrauscht sind. Bei MR-Daten kommt das Problem hinzu, daß, anders als bei CT-Daten, kein Schwellwertverfahren zur initialen Grobsegmentierung eingesetzt werden kann. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Werkzeugen zur schnellen und robusten Segmentierung.

Um Vorwissen über die Form des zu segmentierenden Objekts zu nutzen, wird eine statistische Analyse (PCA) von vorsegmentierten Trainingsdaten durchgeführt. Diese führt zu einer effizienten Parametrisierung der in der Trainingsmenge auftretenden Formvariationen durch deren Hauptmoden (Abbildung 2.17, links). Die Objekte der Trainingsmenge werden durch ihre triangulierten Oberflächen repräsentiert. Ein wesentliches Problem der Formanalyse besteht darin, einen Isomorphismus zu finden, der korrespondierende Punkte zweier Oberflächen aufeinander abbildet. In einem ersten Ansatz wurde eine geometrische Lösung entwickelt, die auf einem Morphingverfahren aufsetzt [5]. Dabei wird lokal die Verzerrung der Abbildung zwischen beiden Flächen minimiert.

Neben der Form werden aus den Trainingsdaten auch Profile der Grauwerte in den zugehörigen Bilddaten entlang der Flächennormalen extrahiert, um die Tatsache zu nutzen, daß der Rand des zu segmentierenden Objekts in den Bilddaten häufig durch einen charakteristischen Sprung im Grauwertprofil gekennzeichnet ist.

Bei der Anwendung des Modells zur Segmentierung eines neuen Bilddatensatzes werden die Grauwertprofile aus den aktuellen Bilddaten mit denen der Trainingsmenge verglichen (Abbildung 2.17, mitte und rechts). Die daraus berechnete Deformation wird nach den Hauptmoden entwickelt und dadurch auf eine „erlaubte“ Form projiziert. Man erhält auf diese Art eine robuste Segmentierung eines Objektes, die zu jedem Zeitpunkt im Rahmen der erlaubten Formvariationen liegt. Voraussetzung ist, daß das Objekt durch Variationen des Modells prinzipiell beschreibbar ist.

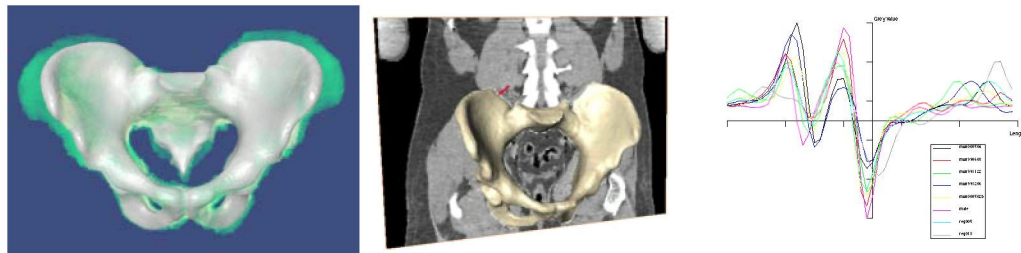


ABBILDUNG 2.17: Links: Variabilität einer Menge von Beckenknochen, dargestellt durch Volume Rendering. Mitte: Modell in CT-Daten mit Profilachse. Rechts: Grauwertprofile entlang Normalenrichtung.

Eine mathematisch vertiefte Behandlung des Themas wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “Mathematics for key technologies” angegangen werden (Teilprojekt F2).

Analyse von Mikrogefäßen

Bearbeitet von: Steffen Prohaska, Malte Zöckler

Kooperationspartner: Jean Pierre Marc-Vergnes, Francis Cassot (Institut National de la Santé et de la Recherche Médicale (INSERM), Service de Neurologie, Toulouse); Gregoire Malandain, Celine Fouard (INRIA, Sophia Antipolis); Christophe Mazel, Didier Asselot (TGS, Bordeaux); Frank Plouraboue (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)); Indeed - Visual Concepts Berlin

Ziel des Projekts ist es eine Umgebung zur Analyse von Blutgefäßnetzwerken (siehe Abbildung 2.18) zu schaffen. Die Bilddaten werden mit konfokaler 3D-Mikroskopie oder mit Synchrotronstrahlung aufgenommen. Die Auflösung von ca. 1μ ist so hoch, daß alle Kapillargefäße gut aufgelöst sind. Am ZIB werden Aufgabenbereiche bearbeitet: die Handhabung extrem großer Datensätze, die Segmentierung und Skelettierung von Bilddaten, sowie die Visualisierung, Analyse und Navigation in Gefäßnetzwerken.

Bei konfokaler Mikroskopie werden mehrere Blöcke mit Überlapp aufgenommen, so daß sich insgesamt ein Volumen von etwa $3000^2 \times 300$ Voxel ergibt; die Bilddaten aus dem Synchrotron haben sogar eine Auflösung von etwa 2000^3 . Selbst auf gut ausgestatteten Workstations ist es nicht möglich, alle Daten komplett im Hauptspeicher zu halten. Alle in dem Projekt verwendeten Algorithmen müssen dem Rechnung tragen. Es wurde daher ein Interface für AMIRA entwickelt, das es ermöglicht, solche Daten

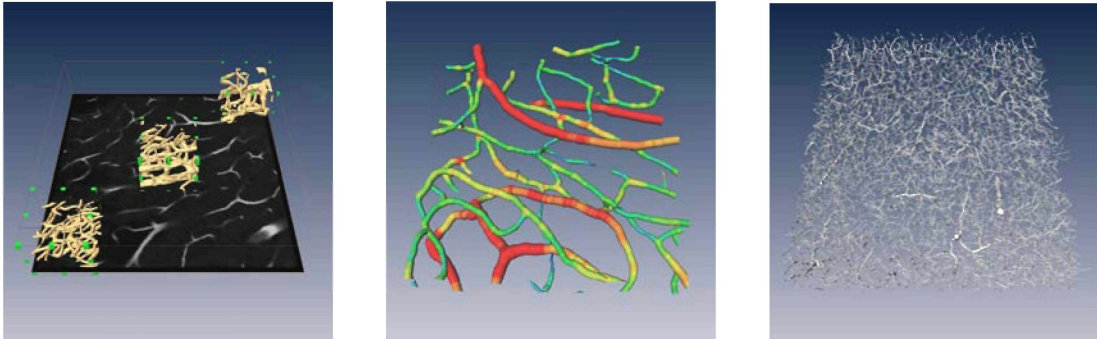


ABBILDUNG 2.18: Gefäßnetzwerk im menschlichen Gehirn. Links: Isoflächen, blockweise dargestellt. Mitte: Ausschnitt, ca. $200 \mu \times 200 \mu$, Gefäßdicke farbko-
diert. Rechts: Überblick (Volumen ca. $1.0 \times 1.0 \times 0.1 \text{ mm}$).

„out of core“ zu verarbeiten. Die Algorithmen sind zum Teil in nichttrivialer Weise zu modifizieren, um sie effizient zu halten.

In einem ersten Schritt werden die Blöcke zu einem großen Datensatz zusammengefaßt. Dieser kann nach geeigneter Filterung durch eine einfache Schwellwertsegmentierung in ein binäres Bild überführt werden. Um die Mittellinien zu extrahieren, wird ein topologie-erhaltender Thinning-Algorithmus verwendet, der speziell für die blockweise Verarbeitung angepaßt wurde. Die Mittellinien werden dann von der Voxel-darstellung in eine Liniendarstellung überführt. Durch eine Distanztransformation der binären Daten kann die Dicke der Gefäße abgeschätzt werden.

All diese Schritte können durch entsprechende Visualisierungen kontrolliert und verifiziert werden. Auch dieses kann aufgrund der Datensatzgröße und der visuellen Komplexität nur blockweise geschehen. Vorhandene Visualisierungsverfahren wurden entsprechend erweitert. Das rekonstruierte Netzwerk kann schrittweise überprüft werden und fehlende Verbindungen können im Nachhinein interaktiv hinzugefügt werden.

Bildbasierte Knochenanalyse

Bearbeitet von: Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Wolfgang Gowin, Dieter Felsenberg, Michael Giehl, Peter Sapparin, Arndt Boshof (Osteoporoseforschungsgruppe, Universitätsklinikum Benjamin Franklin, FU Berlin); Jürgen Kurths, Alexei Zaikin (Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik an der Universität Potsdam); Lis Mosekilde, 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.

Im Projekt „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“, werden neue Methoden entwickelt, um die Knochenstruktur zu quantifizieren. Aus Vorarbeiten der Kooperationspartner sind Komplexitätsmaße für CT-Schnitte in 2D bekannt. Diese Verfahren werden im Rahmen einer größer angelegten Studie angewendet [2]. Außerdem werden sie auf 3D übertragen und erweitert. Ausgangspunkt sind dabei hochaufgelöste Bilddaten (Auflösung: $\approx 30\mu$), die mit einem Mikro-CT gewonnen werden. Die Größe der Proben verlangt eine Aufnahme in mehreren Blöcken mit Überlapp.

Die Verarbeitung der Daten erfolgt in AMIRA. Dazu wurden Spezialmodule zum Alignieren und übergangslosen Zusammenfügen der Blöcke sowie zur symbolischen Kodierung und Berechnung von Komplexitätsmaßen entwickelt.

Eine weitere Problematik ist die Visualisierung der Knochenstruktur. Eine einfache Isofläche für den Übergang zwischen kalkhaltigem Knochen und Mark ist nur für Teilausschnitte möglich (siehe Abbildung 2.19). Für eine gesamte Biopsie erreicht sie leicht eine Größe von mehreren Millionen Dreiecken. Um eine interaktive Visualisierung zu ermöglichen, soll die Struktur auf wesentliche Elemente reduziert werden. Hierzu wurde ein Skelettierungsverfahren entwickelt, das den Knochen auf Mittelflächen und Mittellinien reduziert.

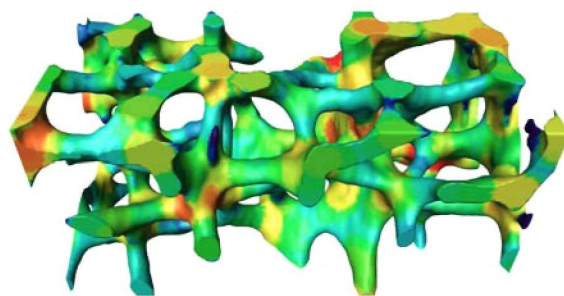


ABBILDUNG 2.19: Ausschnitt aus dem Knocheninneren: Isofläche zwischen kalkhaltigem Gewebe und Mark für Mikro-CT-Daten; die Dicke der Trabekel ist farbkodiert.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Alignierung von mikroskopischen Schnittbildern (Detlev Stalling, Valentin Zaharescu; Kooperation: Sabine Gubatz, Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung, Gatersleben)

Viele mikroskopische Aufnahmeverfahren erfordern es, ein Präparat in dünne Scheiben zu schneiden, und diese dann separat zu untersuchen. Die resultierenden Schnittbilder sind deshalb in der Regel gegeneinander verschoben und verdreht. Bevor aus solchen Daten ein dreidimensionales Modell rekonstruiert werden kann, müssen die Bilddaten deshalb aligniert werden. Dies kann auf unterschiedliche Weise geschehen, zum Beispiel vollständig manuell, mit Hilfe von manuell oder automatisch gefundenen Landmarken, durch eine Bestimmung der Schwerpunkte und Hauptachsen der in zwei Schichten abgebildeten Objekte, oder vollständig automatisch durch Minimierung eines Functionals, das die Ähnlichkeit zweier Schichten beschreibt. Um die präzise Alignierung auch grosser Schnittbildstapel zu ermöglichen, wurde ein entsprechendes Tool für das 3D-Visualisierungssystem AMIRA entwickelt. In diesem Tool sind alle oben erwähnten Ansätze implementiert, so daß die für die jeweiligen Bilddaten am besten geeignete Methode gewählt werden kann.

Ein wichtiges Instrument für die visuelle Kontrolle des Ergebnisses ist die gleichzeitige Darstellung zweier unterschiedlicher Schnittbilder (Abbildung 2.20). Im AMIRA-Alignierungstool kann diese u.a. rot-grün kodiert, mit invertierten Farben oder alternierend in einem Schachbrettmuster erfolgen.

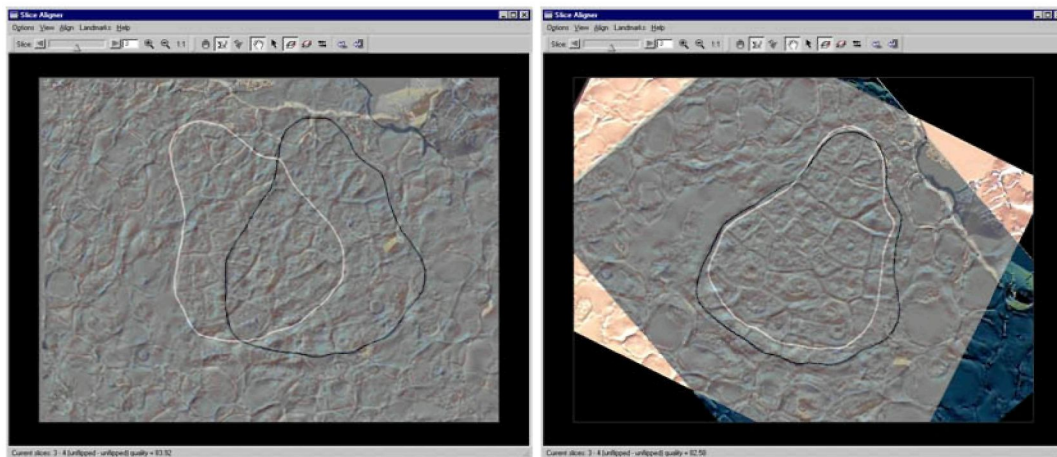


ABBILDUNG 2.20: Gleichzeitige Darstellung zweier Schnitte durch ein Gerstenkorn-Embryo vor und nach erfolgreicher Alignierung.

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

Im Rahmen einer Kooperation wurde ein computergestütztes Bronchoskopiesystem entwickelt und im Krankenhaus Hennigsdorf eingesetzt. Das System besteht aus einem speziellen, von W. Dörffel entwickelten Lichtring-Endoskop und einem Bildverarbeitungsprogramm (Endo3D), das die automatische Segmentierung des Lichtrings sowie die Korrektur der stark verzerrenden Endoskop-Optik ermöglicht. Auf diese Weise lassen sich die genaue Geometrie und Größe des Hohlraums bestimmen. Eine zusätzliche Funktion ermöglicht eine 3D-Rekonstruktion des Hohlraums anhand von mehreren, in bekannten Abständen nacheinander folgenden segmentierten Bildern. Der daraus resultierende Datensatz kann mittels AMIRA visualisiert und ausgewertet werden (Abbildung 2.21).

Gegenwärtig wird das System im Krankenhaus Hennigsdorf weiter getestet, insbesondere auf die Genauigkeit bei Durchmesser- und Volumenmessungen. Die Genauigkeit der Volumenmessung wird durch den Vergleich mit anderen Meßmethoden für unregelmäßige Muster-Volumen ermittelt (sie werden z.B. mit Wasser gefüllt). Die ersten Ergebnisse zeigen, daß die Genauigkeit der Methode für den klinischen Einsatz ausreicht. Das Software-System soll noch im Bezug auf Robustheit verbessert werden. Das Ziel ist, das System bald im Einsatz bei Patienten zu testen.

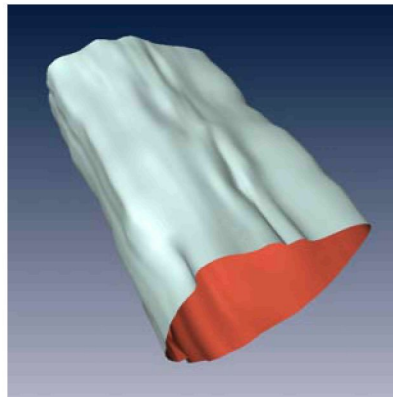


ABBILDUNG 2.21: 3D-Rekonstruktion eines menschlichen Luftröhrensegmentes aus Lichtring-Endoskop-Bildern, visualisiert in AMIRA.

Voxelbasierte Registrierung (Hans Lamecker, Martin Seebaß, Hans-Christian Hege; Kooperation: Thomas Lange, Peter Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch, HU Berlin, Torsten Rohlfing, Calvin R. Maurer, Image Guidance Laboratories, Stanford University, Department of Neurosurgery; Förderung: Sonderforschungsbereich 273, „Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG))

Eines der zuverlässigsten und genauesten Verfahren zur Registrierung von multimo-

den Bilddaten verwendet die *Mutual Information* als Ähnlichkeitsmaß und bestimmt die optimale Transformation mittels eines Multiresolution-Ansatzes. Dabei sind sowohl affine als auch elastische Transformationen erlaubt. Im Graduiertenkolleg 331 „Temperaturabhängige Effekte in Therapie und Diagnostik“ wurde von T. Rohlfing ein solches Verfahren entwickelt. Seine mittlerweile am IGL in Stanford weiterentwickelten Bibliotheken wurden in Kooperation mit dem ZIB in AMIRA integriert und werden insbesondere in der Hyperthermie eingesetzt (Abbildung 2.22).

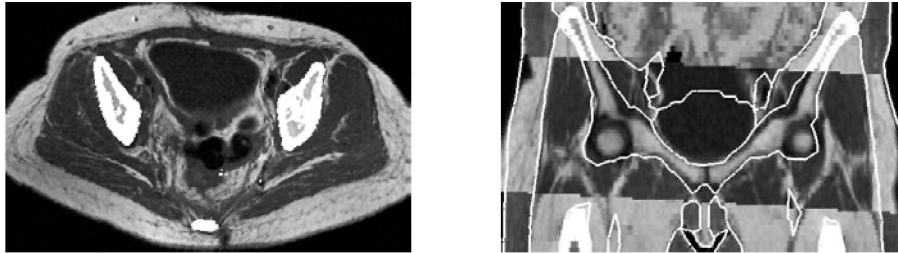


ABBILDUNG 2.22: Registrierung von CT und MR im Beckenbereich: Darstellung mittels Overlay-Technik.

Publikationen

- [1] L. M. Coconu: *Semi-automatic Segmentation of Bronchoscopic Images*, Diploma Thesis, ZIB and „Politehnica“ University of Bucharest, Faculty of Automatics and Computers, Computer Science and Engineering Department, June 2001
- [2] W. Gowin, P. Săparin, D. Felsenberg, J. Kurths, A. Zaikin, S. Prohaska, H.-C. Hege: *Regional Structural Skeletal Discordance Assessed by Measures of Complexity*. Accepted at the IOF World Congress on Osteoporosis 2002, Lisbon
- [3] D. Stalling: *Amira Deconvolution Package 1.0*, User's Guide, Dez. 2001, 35 S., <http://amira.zib.de>
- [4] V.-F. Zaharescu: *Semi-automatic Volume Slices Alignment for 3D Reconstruction and Analysis*, Diploma Thesis, ZIB and „Politehnica“ University of Bucharest, Faculty of Automatics and Computers, Computer Science and Engineering Department, June 2001
- [5] M. Zöckler, D. Stalling, H.-C. Hege, *Fast and Intuitive Generation of Geometric Shape Transitions*, *The Visual Computer*, 16:5 (2000), pp. 241-253.

2.2.6 Virtuelle Labors

Im Arbeitsschwerpunkt „Virtuelle Labors“ werden integrierte Softwaresysteme zur Lösung spezifischer Probleme aus Anwendungsbereichen wie Medizin, Biologie, Biochemie, Chemie und Physik entwickelt. Es hat sich gezeigt, daß die Verknüpfung mo-

derner numerischer, geometrischer und bildverarbeitender Algorithmen mit leistungsfähigen Visualisierungsmethoden unter einer einfach bedienbaren Oberfläche den wissenschaftlichen Anwendern qualitativ neue Möglichkeiten eröffnet.

Amira – Softwareplattform für virtuelle Labors

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

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

Die in den folgenden Abschnitten ausführlicher beschriebenen virtuellen Labors basieren allesamt auf dem Programmsystem AMIRA, das in den vergangenen Jahren am ZIB entwickelt wurde und das seit Ende 1999 auch kommerziell erhältlich ist. Bei AMIRA handelt es sich um ein konsequent objekt-orientiert gestaltetes und vollständig modular aufgebautes 3D-Visualisierungssystem. Das System gestattet unter anderem die Darstellung komplexer statischer und dynamischer Skalar- und Vektorfelder, die Segmentierung dreidimensionaler Bilddaten, die Rekonstruktion von Oberflächen- und Volumengittern, sowie die Simplifizierung und Modifikation solcher Gitter. Die Beliebtheit von AMIRA beruht dabei auf der Tatsache, daß die Komplexität der Algorithmen und des Systems 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.

Um für die Weiterentwicklung von AMIRA zu einem kommerziellen Produkt einen Rahmen zu schaffen, wurde bereits 1999 von ZIB-Mitarbeitern als die Firma *Indeed - Visual Concepts GmbH* gegründet. Die erfolgreiche Zusammenarbeit zwischen Spin-Off ZIB und Indeed wurde auch im Berichtszeitraum weitergeführt. Wie bisher wird die Vermarktung von AMIRA nicht von Indeed selbst übernommen, sondern weltweit von dem Unternehmen Template Graphics Software Inc. (TGS), San Diego (CA), durchgeführt. Im Vergleich zum Vorjahr konnte die Zahl der AMIRA-Nutzer erheblich gesteigert werden, wodurch sich auch neue für das ZIB interessante Forschungskontakte ergeben haben.

Inhaltlich lag der Schwerpunkt der AMIRA-Entwicklungen im Jahr 2001 auf der Fertigstellung der Version 2.3 der Software. Diese Version, die für Windows, Linux, IRIX, Solaris und HP-UX verfügbar ist, bietet eine Reihe neuer Möglichkeiten, angefangen von einem neuen interaktiven Editor für triangulierte Dreiecksnetze, neuen Funktionen zur Segmentierung von 3D-Bilddaten, der Unterstützung von Multi-Channel-Bildern, bis hin zu neuen Tools zur Messung geometrischer Größen. AMIRA 2.3 ist als Standardversion und als erweiterbare Entwicklerversion verfügbar. Die Entwicklerversion ermöglicht es externen Anwendern, das Programm in einfacher Weise um eigene Module bzw. Import- und Export-Funktionen zu ergänzen.

Im letzten Quartal 2001 wurde mit der Entwicklung einer speziellen AMIRA-Version für immersive Stereo-Display-Systeme bzw. große Projektionswände begonnen. Die

Version erlaubt es, auf geeigneten Hardware-Plattformen mehrere Grafik-Pipes gleichzeitig zu nutzen und so entsprechende Display-Systeme zu betreiben. Um die Steuerung der Software in einer immersiven Umgebung zu ermöglichen, wurde eine 3D-Widget-Bibliothek entwickelt, die das AMIRA-User-Interface in den 3D-Raum abbildet, siehe Abbildung 2.23.

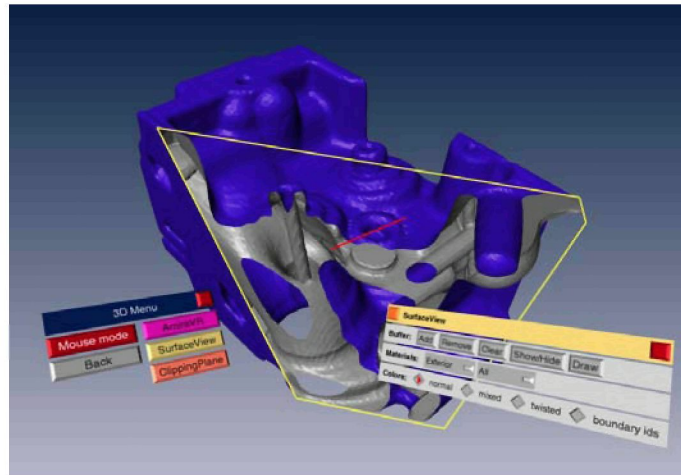


ABBILDUNG 2.23: 3D-Menüs zur interaktiven Steuerung von AMIRA-Modulen in einer immersiven Arbeitsumgebung.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Malte Zöckler, Peter Deuffhard

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

Förderung: Projektverbund „Virtuelles Gehirn: Visualisierung von 3D-Strukturen und Funktionen“ des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF)

Ziel dieses BMBF-Verbundprojektes ist die Erforschung anatomischer neuronaler Systeme mit Hilfe bildgebender und computergestützter Verfahren.

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.

Die Schwerpunkte der im Moment laufenden zweiten Förderperiode sind 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 (Abbildung 2.24).

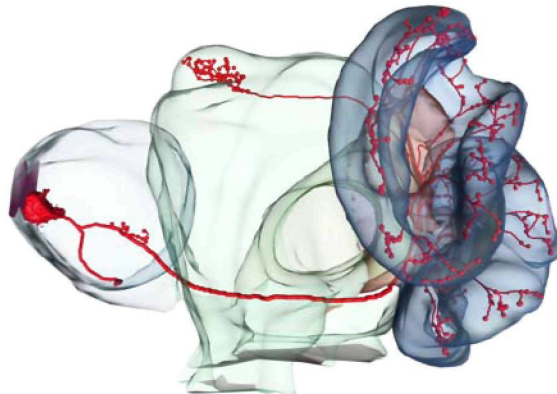


ABBILDUNG 2.24: Rekonstruiertes geometrisches Modell eines Projektions-Neurons im Gehirn der Honigbiene, welches vom Antennal-Lobus zum Pilzkörper verläuft. Das Modell ist in eine Oberflächenrekonstruktion einiger anatomischer Grobstrukturen (Pilzkörper) eingepaßt. Daten: AG Menzel, FU Berlin.

Im Jahr 2001 wurden Fortschritte in allen drei Bereichen erzielt: Zur Extraktion geometrischer Modelle von einzelnen Nervenzellen wurden gute Erfolge mit einem modellbasierten Verfahren zur automatischen Extraktion von sogenannten Varikositäten erzielt. Die so gewonnenen Datensätze lassen sich zum Zwecke der Visualisierung mit einem neu entwickelten Verfahren in triangulierte Modelle umwandeln.

Zur Integration funktioneller Daten aus unterschiedlichen Quellen oder Experimenten ist das Problem der Registrierung zu lösen. Anders als in vielen medizinischen Anwendungen können hier jedoch oft nicht die zu betrachtenden Strukturen selbst als Referenz verwendet werden. Es wurden daher Algorithmen entwickelt, die ein globales Transformationsfeld aus den Transformationen einzelner Teilstrukturen errechnet. Die Verfahren wurden auf exemplarische biologische Fragestellungen angewendet [7].

Die Werkzeuge sind als Add-Ons für die kommerziell verfügbare Visualisierungs-umgebung AMIRA implementiert worden und werden interessierten Arbeitsgruppen zur Verfügung gestellt. Dieses Projekt bildet die Ausgangsbasis eines mathematisch-neurobiologischen Projektes (C3) im Rahmen des beantragten SFB 1946, der Mitte

2002 zur Begutachtung ansteht.

Virtuelles Molekül-Labor

Bearbeitet von: Daniel Baum, 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)

Die Möglichkeiten zur Molekülvisualisierung in AMIRA wurden weiterentwickelt und in der Erweiterung AMIRAMol gebündelt, die seit August 2001 als Testversion frei verfügbar ist [3]. In Zusammenarbeit mit dem Projekt *Konformationsdatenbanken für das virtuelle Screening* (Schwerpunkt 2.2.1) wurde an Methoden zur Visualisierung dynamischer molekularer Konformationen gearbeitet. Im Hinblick auf durchzuführende molekuldynamische Simulationen wurde die Entwicklung eines Moleküleditors begonnen.

MOLEKÜL-EDITOR UND SELEKTIONSFENSTER. Ein neuer AMIRA-Editor erlaubt es, Moleküle interaktiv zu verändern. So können einzelne Atome oder Atomgruppen verschoben, Bindungs- und Torsionswinkel verändert und Bindungen neu geknüpft oder gelöscht werden. Ferner ermöglicht der Editor das Teilen oder Zusammenfügen von Molekülen. Der Molekül-Editor wird im allgemeinen in Kombination mit einem neuen Interaktionsfenster, dem Selektionsfenster, verwendet, das es ermöglicht, auf einfachste Weise bestimmte Bereiche eines Moleküls auszublenden und andere hervorzuheben. Die selektierten Atome können von verschiedenen Modulen, z.B. zur Alignierung von Molekülen, verwendet werden.

KONFORMATIONSVISUALISIERUNG. Der Algorithmus zur Berechnung von Konfigurationsdichten [8] wurde überarbeitet, um dem Anwender ein einfacher zu bedienendes, schnelleres Werkzeug zur Verfügung zu stellen. Die Verwendung eines modifizierten 3D-Bresenham-Algorithmus führte zu einer Halbierung der Laufzeit.

SEQUENZ-STRUKTUR-ALIGNIERUNG. Um die Struktur zweier Moleküle miteinander vergleichen zu können, muß man in der Lage sein, die Moleküle so zu transformieren, daß ähnliche Bereiche der Moleküle dicht beieinander liegen. Hierzu ist oft eine Vorabzuordnung von Atomen der beiden Moleküle notwendig. Bei kleinen Molekülen kann diese per Hand gemacht werden, für große ist dies nicht praktikabel. Es wurde daher ein Sequenz-Alignierungsalgorithmus in AMIRA implementiert, der eine Zuordnung von Residuen der beiden Moleküle zueinander vornimmt. Diese Zuordnung wird anschließend verwendet, um die Moleküle strukturell zu alignieren (Abbildung 2.25).

MOLEKÜLOBERFLÄCHEN. Zur Berechnung molekularer Oberflächen wurde ein neuer Ansatz verfolgt, der Einschränkungen des bisherigen Algorithmus überwindet. So erlaubt er einerseits partielle Oberflächen zu berechnen und andererseits ohne Zusatzaufwand Lösungsmitelein-schlüsse zu finden.

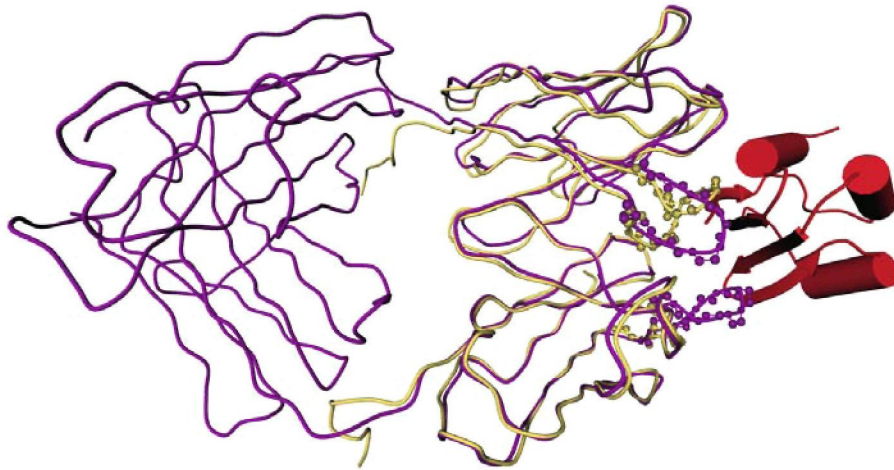


ABBILDUNG 2.25: Kombiniertes Sequenz- und Strukturalignment eines menschlichen Immunglobulin-Fragmentes (1IGM) mit einem Antikörper / Antigen-Komplex einer Maus (2JEL); Backbone-Darstellung von 1IGM (heller Schlauch) und 2JEL (dunkler Schlauch) und Sekundärstruktur-Darstellung des an 2JEL gebundenen Antigens.

KOVARIANZANALYSE VON KONFIGURATIONSMENGEN. Um die Flexibilität einer dynamischen Konformation analysieren und visualisieren zu können, wurden Module zur Kovarianzanalyse molekularer Freiheitsgrade auf Basis von Konfigurationsmengen entwickelt. Es ist damit sowohl möglich die Statistik einzelner Freiheitsgrade als auch ihre Korrelation untereinander zu untersuchen. Als Freiheitsgrade stehen entweder die kartesischen Koordinaten der Atome oder eine Parametrisierung des Moleküls durch Bindungslängen, Bindungs- und Torsionswinkel zur Verfügung.

Durch Aufstellen einer Kovarianzmatrix und Bestimmung ihres Eigensystems kann eine Hauptmodenanalyse durchgeführt werden. Die sich daraus ergebenden Hauptmoden können durch kombinierte Animation der beteiligten Elementarfreiheitsgrade visualisiert werden.

ALIGNMENT INNERHALB VON KONFIGURATIONSMENGEN. Eine Vielzahl von Darstellungs- und Analysemethoden für Konfigurationsmengen setzt eine geometrische Alignierung der einzelnen Konfigurationen zueinander voraus. Die in verschiedenen AMIRA-Modulen vorhandenen Möglichkeiten eine solche Alignierung durchzuführen wurden in einer eigenen Programmeinheit gebündelt und stehen nun in allen betroffenen Modulen in vollem Umfang und einheitlicher Weise zur Verfügung. Ergänzend wurde die Möglichkeit geschaffen, eine Alignierung für eine Menge von Molekülkonfigurationen zu berechnen, ohne eine Konfiguration als Referenz auswählen zu müssen, indem die Abstände sämtlicher Paare von Konfigurationen

gleichzeitig minimiert werden.

Virtuelles Astrophysik-Labor

Bearbeitet von: Werner Benger, Ralf Kähler, Hans-Christian Hege, 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)); Manuella Campanelli, Carlos Lousto (University of Texas, (Brownsville, USA))

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Im Albert-Einstein-Institut Golm beschäftigt sich die Arbeitsgruppe „Numerische Relativitätstheorie“ mit der Vorhersage von Gravitationswellen, die bei der Kollision Schwarzer Löcher entstehen und voraussichtlich schon bald auf der Erde gemessen werden können. Der Kollisionsprozess selbst kann dabei nur durch die numerische Behandlung der vollständigen Einstein-Gleichungen des Gravitationsfeldes berechnet werden. Auf große Distanzen hinweg scheitern diese Verfahren jedoch an der auf heutigen Großrechnern verfügbaren Speicher- und Rechenkapazität. Da das Endresultat eines solchen Kollisionsprozesses theoretisch bekannt ist, kann für die längerfristige Vorhersage der Ausbreitung von Gravitationswellen über großräumige Gebiete mit nur schwacher Gravitation die Störungsrechnung eingesetzt werden.

Im Lazarus-Projekt des AEI [14] wurden numerische Verfahren entwickelt, die es erlauben, die numerische Behandlung der vollständigen Einsteingleichungen störungstheoretisch fortzusetzen. Die Lazarus-Daten beschreiben dabei die Abweichungen von der Raumzeit eines rotierenden Schwarzen Loches und müssen zur Visualisierung von diesem Koordinatensystem in kartesische Koordinaten umgerechnet werden. Die notwendige Transformation der Gitterpunkte und die Interpolation der Daten vom numerischen Gitter auf das für die Visualisierung jeweils benötigte Gitter können in einem von der Faserbündeltheorie inspirierten Datenmodell elegant formuliert werden. Nach Vorgabe von Transformationsregeln zwischen den verschiedenen Koordinatensystemen sowie Daten auf einem Ursprungs-Gitter und -Koordinatensystem wird dabei die jeweils beste Reihenfolge von Transformationsregeln und Interpolationsverfahren für eine bestimmte Visualisierungsmethode selbständig ermittelt (Abbildung 2.26).

Die Implementierung des Faserbündelmodells wurde des weiteren mit einem I/O Layer auf Basis von HDF5 [17] ausgestattet, mit Hilfe dessen Daten aus beliebigen Datenquellen (lokale oder entfernte Dateien, oder via Netzwerk direkt übertragene) gelesen und zur Visualisierung zu einem konsistenten Datensatz zusammengefügt werden. Es bietet eine ideale Basis für die künftigen Arbeiten zur Tensorfeldvisualisierung.

Der zweite Teil des Projektes befaßte sich mit der Visualisierung von Daten auf hierarchischen Gittern. Hier wurde ein Verfahren entwickelt, das texturbasiertes Volume Rendering von großen, uniformen Datensätzen beschleunigt. Die Kernidee basiert dar-

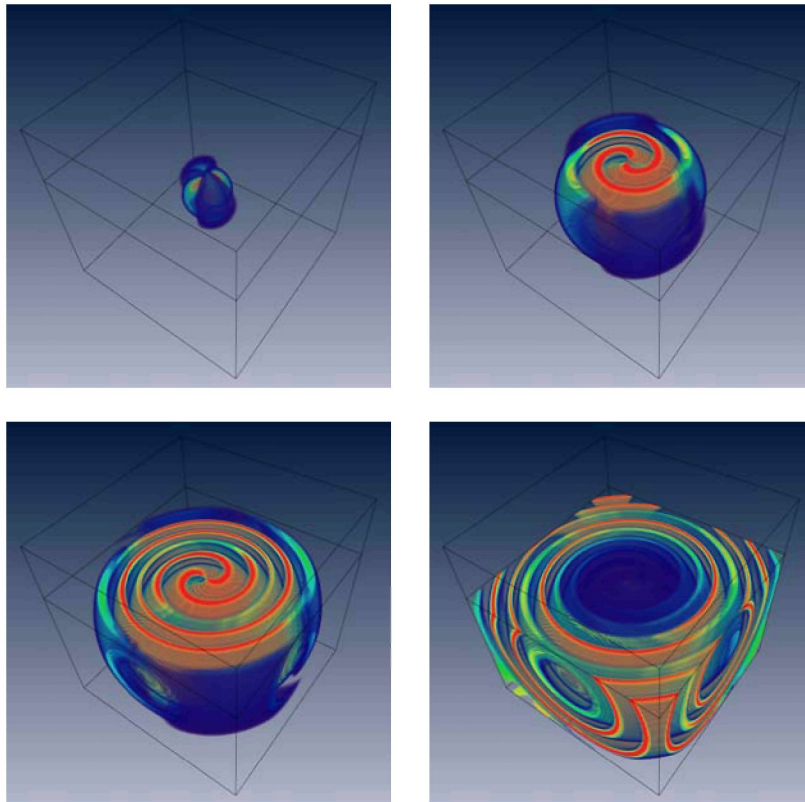


ABBILDUNG 2.26: Darstellung der Entstehung von Schwerkraftwellen, wie sie bei der Kollision eines Doppelsystems sich einst umkreisender Schwarzer Löcher entstehen. Der Drehimpuls des ursprünglichen Systems bewirkt die spiralförmige Ausbreitung der Gravitationsenergie, bis zuletzt ein rotierendes Schwarzes Loch übrig bleibt, das selbst keine Gravitationsenergie mehr abstrahlt (im Zentrum des letzten Bildes zu denken) [13, 12, 15, 16].

auf, daß in vielen Fällen nur ein Bruchteil der Gitterzellen wesentliche Information enthält und somit deutliche Geschwindigkeitsvorteile erzielt werden können, indem die nicht relevanten, weil z.B. transparenten Bereiche, bei der Darstellung ausgelassen werden. Dies gilt insbesondere für texturbasierte Ansätze, da die erzielte Framerate hier durch die Füllrate der Grafik-Hardware begrenzt wird.

Für diese Klasse von Volume-Rendering-Verfahren ist es von Bedeutung, daß die relevanten Bereiche durch eine geringe Anzahl an achsenparallelen Boxen überdeckt werden, die ihrerseits möglichst wenig nicht relevante Zellen enthalten. Im vorgestellten Verfahren wird hierzu mit Hilfe eines Clustering-Algorithmus aus den Originaldaten eine räumliche Hierarchie von Hexaedern generiert, deren Blattknoten die relevanten Bereiche des Ausgangsdatensatzes effektiv im oben genannten Sinne überdecken. Diese Untermenge des Datensatzes wird in eine interne Texturdarstellung konvertiert und in der Rendering-Pipeline mithilfe eines kD-Baumes in einer dem jeweiligen

Blickpunkt entsprechenden Reihenfolge von hinten nach vorne traversiert [4]. Tests an hochaufgelösten Datensätzen ergaben deutliche Beschleunigungsraten gegenüber herkömmlichen Verfahren (Abbildung 2.27).

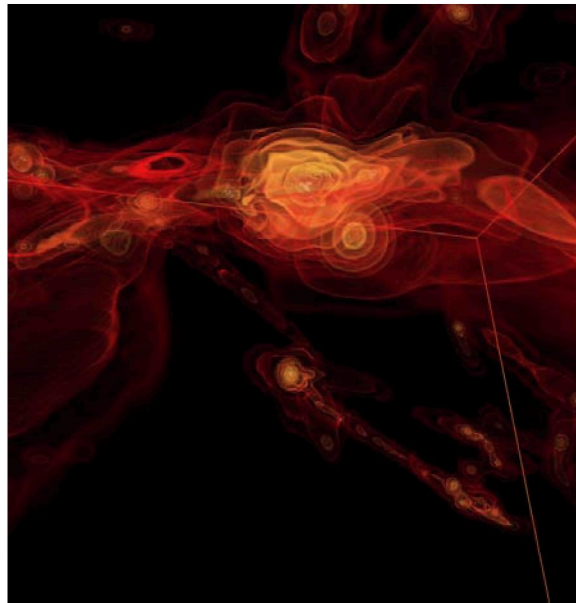


ABBILDUNG 2.27: Volume-Rendering-Darstellung von Daten auf einem hierarchischen Gitter mit 11 (!) Verfeinerungstufen. Die AMR-Simulation zur Analyse der Entstehung von Galaxienclustern wurde in der Forschungsgruppe von Mike Norman (NCSA) durchgeführt.

Ferner wurde ein Algorithmus zum texturbasierten Volume Rendering von Daten entwickelt, die bereits auf hierarchischen Gittern vorliegen [5]. Hierbei wird die hierarchische Struktur der Daten genutzt, um den Detailgrad der Darstellung an die jeweils zur Verfügung stehende Rechen- bzw. Grafikleistung anzupassen. Unter anderem wurde eine Heuristik vorgestellt, die das Simulationsgebiet in möglichst wenig nicht überlappende achsenparallele Bereiche unterteilt, welche jeweils nur aus Zellen der gleichen Auflösungsstufe bestehen. Diese Blöcke werden separat mit einer ihrer Auflösung entsprechenden Dichte von texturierten Polygonen in einer blickpunktconsistenten Reihenfolge dargestellt. Sogenannte Opazitäts-Korrekturen der Farbtabelle wurden verwendet, um Artefakte durch die variierenden Polygondichten zu vermeiden.

Landschaftsvisualisierung

Bearbeitet von: Liviu Coconu, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Armin Werner, Philip Paar (Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, ZALF Müncheberg); Oliver Deussen (Fakultät Informatik,

TU Dresden); Jürgen Döllner (Hasso-Plattner-Institut, Potsdam)

Für ein Verbundprojekt zum Thema Landschaftsplanung, bei dem das ZIB die Aufgabe der Echtzeitdarstellung von hochkomplexen Landschaftsszenen übernommen hat, wurden Vorarbeiten geleistet. Das Projekt wird ab Frühjahr 2002 durch die Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU) gefördert.

Zunächst wurden Rendering-Verfahren untersucht, die durch geeignetes Preprocessing und effiziente Szenen-Repräsentation eine Chance bieten, auch Szenen mit sehr vielen komplexen Objekten, etwa Tausenden von Pflanzen, in Echtzeit zu rendern (Abbildung 2.28). Als besonders vielversprechend haben sich punktbasierte Verfahren herausgestellt, da sich Punktmodelle besonders für hochkomplexe, unstrukturierte und nicht-kompakte Objekte, wie z.B. Bäume, eignen und sich Level-Of-Detail (LOD) Repräsentationen auf einfache Weise erzeugen lassen. So kann die Objekt-Komplexität an die Ausgabe-Komplexität angepasst werden, welche durch die Bildschirmauflösung und die Größe des Objektes auf dem Bildschirm begrenzt ist.



ABBILDUNG 2.28: 3D-Sicht auf eine Wald-Szene, bestehend aus Dreieck- und Punkt-Primitiven. Bei herkömmlicher polygonaler Repräsentation würde diese Szene mit 50×50 Bäumen insgesamt 625 Millionen Dreiecke enthalten.

Es wurde ein Verfahren entwickelt, das die Vorteile verschiedener Rendering-Paradigmen kombiniert. Für feine Details wird das traditionelle dreieckbasierte Rendering verwendet, da es hierfür effizienter ist als Punkt-Rendering und die Hardware für Dreieck-Primitive hoch optimiert ist. Entfernen sich Objekte von der virtuellen Kamera, z.B. beim Durchwandern der Szene, werden weniger detaillierte LOD-Darstellungen ausgewählt. Dadurch kann die Anzahl der tatsächlich gezeichneten Primitive begrenzt werden. Ein wesentliches Feature ist die Nutzung der verfügbaren Hardware-Beschleunigung, sowohl für Dreieck- als auch für Punkt-Rendering. Das

Verfahren kann auch normale, geometrische Modelle und kompakte Oberflächen rendern, und ist somit für beliebige Szenen einsetzbar.

Künftig sollen weitere Hardware-Features moderner Grafikkarten zur Verbesserung der Bild-Qualität und der Beschleunigung genutzt werden sowie Verfahren erarbeitet werden, die glattere Übergänge zwischen verschiedenen LODs ermöglichen und zeitliches Aliasing vermeiden. Die hierarchischen Szenen-Repräsentationen soll verbessert und Spezialverfahren für Terrain-Rendering sollen integriert werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Multiresolution-Flächenmodelle (Oliver Sander, Hans-Christian Hege, Martin Seebaß; Kooperation: Rolf Krause, Stefan Felsner, Fachbereich Mathematik und Informatik, FU Berlin)

Zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen sind typischerweise äußere und innere Ränder des Rechengebietes zu spezifizieren, im R^3 also 2D-Flächen. Die Gesamtheit der Flächen kann als Bestandteil einer einzigen, sich verzweigenden Fläche aufgefaßt werden. Zur numerischen Lösung wird diese Nichtmannigfaltigkeitsfläche typischerweise stückweise linear approximiert. Das entstehende Flächengitter ist eine Teilmenge des zur räumlichen Diskretisierung verwendeten Volumengitters.

Moderne numerische PDE-Solver starten mit einem Grobgitter, das in einem Vorverarbeitungsschritt aus einem feineren Gitter gewonnen wird und während der Rechnung, gesteuert durch lokale Fehlerschätzer, lokal verfeinert wird. Die üblicherweise verwendeten Verfahren lassen beim Verfeinern die Randgeometrie unverändert, d.h. die geometrische Approximation der Ränder der Teilgebiete bleibt während der gesamten Rechnung auf dem Niveau des Grobgitters.

Im Rahmen einer Diplomarbeit [6] wurde ein Verfahren entwickelt, das durch wiederholte Anwendung von lokalen Reduktionsschritten ein gegebenes Dreiecksgitter iterativ vergrößert und – parallel –, startend mit der Identitätsabbildung, eine Parametrisierung des feinsten Gitters über dem jeweiligen Grobgitter aufbaut. Die durch das initiale Feingitter gegebene geometrische Form ist somit in jedem Schritt durch das größte Gitter plus eine auf diesem definierte „Detail-Funktion“ gegeben. Das Vergrößerungsverfahren beachtet Qualitätsmaße für die Güte von FE-Gittern (aus numerischer Sicht) und vermeidet Topologieänderungen sowie Selbstüberschneidungen. Es wurde demonstriert, wie sich die so gewonnenen Parametrisierungen beim Verfeinern von Tetraeder-Gittern nutzen lassen, u.a. durch Anwendung auf ein biomechanisches Kontaktproblem (in Zusammenarbeit mit Rolf Krause, FU Berlin).

Für ein praktisch verwendbares Verfahren sind noch eine Reihe von Problemen zu lösen, u.a. zur Verfeinerungsstrategie, zu geometrie-sensitiven Fehlerschätzern, und zur Aufgabe der restriktiven Topologie-Invarianz beim Vergrößern und Verfeinern.

Anwendung der Tele-Immersion in Weitverkehrsnetzen (André Merzky, Harald Knipp, Tino Weinkauf; Kooperation: Alexander von Berg, Stephan Olbrich, Helmut Pralle, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen RRZN/Lehrgebiet Rechnernetze und Verteilte Systeme RVS; Universität Hannover; Siegfried Raasch, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover; Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), Deutsches Forschungsnetz (DFN))

In dem gemeinsam mit dem RRZN Hannover durchgeführten Projekt ist die Hauptaufgabe des ZIB die Entwicklung einer Bibliothek zur parallelen Extraktion von Visualisierungsdaten aus einer laufenden Computersimulation. Diese Bibliothek wurde wie in der Abbildung 2.29 gezeigt entworfen. Hierbei zeichnen die oberen Schichten für die Repräsentation der Daten verantwortlich. Die mittleren Schichten übersetzen diese Datenrepräsentation in eine der jeweils gewählten Visualisierungsmethode angepasste Variante. Die in den unteren Schichten befindliche Visualisierung erzeugt dann aus den Daten eine geometrische Repräsentation, welche über verschiedene Streamingverfahren zum Visualisierungsclienten verschickt wird.

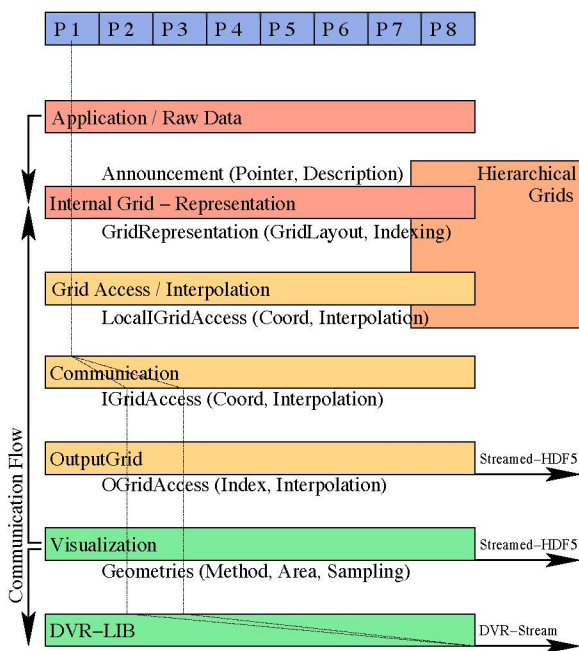


ABBILDUNG 2.29: Aufbau der „Parallel Data Extraction and Visualization Library“ (PaDEV): Eine parallele Datenextraktionsschicht stellt dem ebenfalls verteilten Visualisierungsalgorithmus Applikationsdaten zur Verfügung. Die Ausgabe der dort erzeugten Geometrien erfolgt über verschiedene Streaming-Verfahren.

Es wurde begonnen, diese Architektur prototypenhaft zu implementieren. Weitere Arbeitspunkte in diesem Projekt sind Methoden zur Vektorfeldvisualisierung und der Einsatz von Videokonferenzsystemen auf Basis des vom DFN propagierten H.323-Standards. Die Ergebnisse werden in ein neues beim BMBF/DFN beantragtes und technisch bereits akzeptiertes Projekt (GriKSL) einfließen.

Kooperative Virtuelle Labors (Thilo Böhm, Andre Merzky, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege)

Um bei komplexen Problemlösungen in virtuellen Labors die Mitarbeit von räumlich

entfernten Experten zu ermöglichen, wird AMIRA derart erweitert, daß sich mehrere Instanzen parallel und kooperativ nutzen lassen.

AMIRA bietet bereits die Möglichkeit, über Skriptanweisungen eine AMIRA-Instanz eine vorgegebene Folge von Arbeitsschritten ausführen zu lassen. Im kooperativen Fall sollen nun mehrere Instanzen von AMIRA durch den Austausch solcher Anweisungen koordiniert zusammenarbeiten.

Hierzu wurde AMIRA um entsprechende Kommunikationsmittel erweitert. Als Kommunikationsarchitektur wurde eine Client/Server-Architektur gewählt, da hier, im Gegensatz zur alternativen Peer-to-Peer-Variante, eine zentrale Steuerung der Sitzung möglich ist. Über einen Sitzungsmanager (Server) werden alle Aktivitäten in dem System koordiniert. In einer Sitzung befinden sich zu jedem Zeitpunkt mehrere Sitzungsteilnehmer (Klienten), einer davon aktiv, der Rest passiv. Führt der aktive Klient eine Aktion in seiner AMIRA-Instanz aus, wird eine entsprechende Nachricht erzeugt, zum Sitzungsmanager übertragen und anschließend an die restlichen, passiven Klienten verteilt. Bei diesen wiederum wird die empfangene Nachricht als Anweisung interpretiert und innerhalb der AMIRA-Instanz ausgeführt. Dadurch befinden sich alle Klienten im gleichen Arbeitsschritt. Neu entwickelte Kommunikationsprotokolle und Schnittstellen sorgen für die Synchronisation und den Datenabgleich. Für den Datentransport und die aus Sicherheitsgründen notwendige Authentifizierung der teilnehmenden Klienten sollen Mechanismen der Grid-Technologie eingesetzt werden.

Die entwickelten Techniken sollen zunächst für ein verteiltes, kooperatives Chirurgieplanungssystem verwendet werden. Gemeinsam mit dem Klinikum rechts der Isar (TU München) wurde eine Förderung beim BMBF/DFN beantragt und zum Frühjahr 2002 bewilligt.

Visualisierung von zeitabhängigen 3D-Vektorfeldern (Tino Weinkauff; Kooperation: Bernd Noack, Michael Schlegel, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik HFI, TU Berlin)

In diesem Projekt sollen neue Methoden zur topologischen Analyse und Visualisierung von 3D-Vektorfeldern entwickeln werden. Im Fokus sollen hierbei insbesondere zeitabhängige Vektorfelder stehen.

Im Jahr 2001 wurde AMIRA um ein Verfahren zur Berechnung von Krümmungsgrößen von Vektorfeldern erweitert; dies beinhaltet die Krümmung und Torsion der Tangentenkurven sowie die mittlere und Gaußsche Krümmung der Normalenflächen [9]. Die Skalarfelder haben die Eigenschaft, in der Nähe kritischer Punkte des Vektorfeldes i.a. zu divergieren. Dies ermöglicht Visualisierungen zur Topologie der Vektorfelder, insbesondere eine Darstellung der Lage der kritischen Punkte (Abbildung 2.30). Die Ergebnisse dieser Arbeiten wurden in einer Veröffentlichung zusammengefaßt [10].

Ende des Jahres wurde mit Vertretern des Hermann-Föttinger-Instituts für Strömungsmechanik eine Zusammenarbeit auf diesem Gebiet vereinbart.

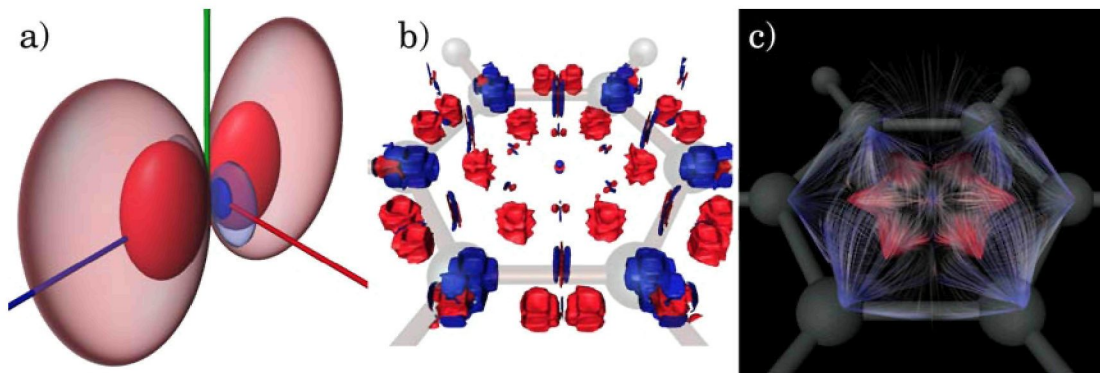


ABBILDUNG 2.30: Visualisierungen des mittleren Krümmungsfeldes verschiedener Vektorfelder: a) Lineares Vektorfeld $V = (-2x, -y, 2z)^T$; b) Elektrostatisches Feld eines Benzolmoleküls: Die Isoflächendarstellung der mittleren Krümmung hebt die Position der kritischen Punkte hervor.; c) Benzolmolekül: Nutzung der mittleren Krümmung zur Beeinflussung der Farbkodierung, Verteilung und Transparenz von beleuchteten Stromlinien.

Publikationen

- [1] *Amira 2.3 – User’s Guide and Reference Manual*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und Indeed - Visual Concepts, Berlin, 412 S., August 2001
- [2] *AmiraDev 2.3 – Programmer’s Guide*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und Indeed - Visual Concepts, Berlin, 118 S., August 2001
- [3] *AmiraMol 0.9, A Molecular Visualization Extension for Amira – User’s Guide and Reference Manual*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und Indeed - Visual Concepts, Berlin, 61 S., August 2001
- [4] Ralf Kähler, Mark Simon, Hans-Christian Hege, *Fast Volume Rendering of Sparse High-Resolution Datasets Using Adaptive Mesh Refinement Hierarchies*, Report 01-25, ZIB, 2001, angenommen bei: IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics.
- [5] Ralf Kähler, Hans-Christian Hege, *Interactive Volume Rendering of Adaptive Mesh Refinement Data*, Report 01-30, ZIB, 2001, angenommen bei: The Visual Computer.
- [6] Oliver Sander, *Constructing Boundary and Interface Parametrizations for Finite Element Solvers* Diplomarbeit, FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Oktober 2001.

- [7] Karlheinz Rein, Malte Zöckler, Michael T. Mader, Cornelia Grübel, and Martin Heisenberg, *The Drosophila Standard Brain*, angenommen bei: Current Biology
- [8] Johannes Schmidt-Ehrenberg, Daniel Baum und Hans-Christian Hege, *Visually stunning - Molecular conformations*, The Biochemist, 23:5, 22–26, 2001.
- [9] Tino Weinkauff, *Krümmungsvisualisierung für 3D-Vektorfelder*, Diplomarbeit, Universität Rostock, Fachbereich Informatik, Juli 2000.
- [10] Tino Weinkauff und Holger Theisel, *Curvature Measures of 3D Vector Fields and their Applications*, eingereicht bei: WSCG'2002, Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision.
- [11] Malte Zöckler, Karlheinz Rein, Robert Brandt, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege, *Creating Virtual Insect Brains with Amira*, Report 01-31, ZIB, 2001.
- [12] Markus Pössel, *Lazarus und das große Fressen*, Spektrum der Wissenschaft, 03/2002, p. 16 ff.
- [13] *Black holes take the plunge*, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik (Albert-Einstein-Institut), Potsdam, http://www.aei-potsdam.mpg.de/about/news/PM_details.html
- [14] J. Baker, M. Campanelli, C. Lousto, *The Lazarus project: A pragmatic approach to binary black hole evolutions*, Phys. Rev. Lett. 87, 121103; 2001, <http://arXiv.org/abs/gr-qc/0104063>
- [15] Sarah Tomlin, *Gravitational physics: Black hole blockbuster*, Nature Vol. 413, (2001), p. 473
- [16] *Schwerkraftwellen erstmals sichtbar*, National Geographic, December, Vol. 12, 18 (2001). http://www.nationalgeographic.de/php/magazin/redaktion/2001/12/redaktion_geographica.htm
- [17] *HDF5 - A New Generation of HDF*, <http://hdf.ncsa.uiuc.edu/HDF5/>

2.2.7 Nichtlineare Optimierung und Steuerung

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 semi-definiter Relaxierungen.

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.

Erwähnenswert ist sicher, daß in diesem Schwerpunkt Mitarbeiter der Teilbereiche *Numerische Methoden* und *Diskrete Methoden* gemeinsam arbeiten.

Lehrbuch Numerische Mathematik II. Gewöhnliche Differentialgleichungen

Bearbeitet von: Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Folkmar Bornemann

Für die zweite Auflage des Lehrbuchs (bei de Gruyter [1]) wurde ein neues Kapitel über Randwertprobleme und optimale Steuerungen verfaßt:

Kapitel 8. Auch bei *Randwertproblemen* gehen wir von analytischen Aussagen zur (lokalen) Eindeutigkeit aus. Sie stellen die Basis der Definition von *Konditionszahlen* für Randwertprobleme dar, die invariant gegen affine Transformation der Randbedingungen sind. Der Vergleich mit Anfangswertproblemen legt eine Unterscheidung in zeit- und raumartige Probleme nahe. Bei *zeitartigen* Randwertproblemen existiert eine klar ausgezeichnete Vorzugsrichtung, in der das Anfangswertproblem gutkonditioniert ist; die unabhängige Variable ist typischerweise als Zeit interpretierbar. Bei *raumartigen* Randwertproblemen existiert keine solche Vorzugsrichtung; die unabhängige Variable ist typischerweise als Raumvariable interpretierbar, oft entsteht dieser Problemtyp durch Reduktion von Randwertproblemen bei partiellen Differentialgleichungen auf eine Raumdimension. Dem entspricht eine klare Orientierung in Richtung auf zwei effiziente Verfahrensklassen:

- für *zeitartige* Probleme auf die *Mehrzielmethode*,
- für *raumartige* Probleme auf adaptive *Kollokationsmethoden*.

In beiden Verfahrensklassen ergibt sich jeweils die Definition *diskreter Konditionszahlen* unmittelbar. Sie taucht zugleich auf in der Analyse von Eliminationsverfahren für die auftretenden *zyklischen* linearen Gleichungssysteme. Neben den klassischen Zweipunkt-Randwertproblemen geben wir noch einen Einblick in unterbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Berechnung periodischer Orbits*, und in überbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Parameteridentifizierung* in Differentialgleichungen. Zum Abschluß erwähnen wir noch, in gebotener Kürze, Probleme der *Variationsrechnung* und der *optimalen Steuerung*, die in der Regel auf Mehrpunkt-Randwertprobleme führen.

Die neue Auflage enthält eine Reihe bisher noch nicht publizierter Resultate.

Die englische Übersetzung „Scientific Computing with Ordinary Differential Equations“ von W. C. Rheinboldt erscheint bei Springer New York [2].

Komplementaritätsmethode für Probleme der optimalen Steuerung

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Fredi Tröltzsch (TU Berlin)

Die zur Lösung von Problemen der optimalen Steuerung eingesetzten direkten und indirekten Methoden weisen spezifische Nachteile auf. Dies sind der Strukturverlust durch vorzeitige Diskretisierung bei direkten Verfahren und die bei indirekten Verfahren erforderliche aufwendige analytische Vorarbeit.

Das in den letzten Jahren vorgeschlagene direkte Verfahren, das konzeptionell im unendlichdimensionalen Funktionenraum arbeitet und somit die Nachteile klassischer Zugänge vermeidet, wurde im Berichtszeitraum weiterentwickelt [13, 14]. Die Ungleichungsnebenbedingungen werden durch einen den Innere-Punkte-Verfahren verwandten Komplementaritätsansatz in eine Homotopie nichtlinearer Gleichungen überführt. Abweichend von anderen Mehrgitter-Methoden in der Optimierung erfolgt durch den Einsatz eines inexakten Newton-Pfadverfolgungsalgorithmus die Diskretisierung erst in der innersten Schleife (Abbildung 2.31). Die adaptive Gitterverfeinerung für die linearen Newton-Systeme erfaßt dabei auch stark lokale Effekte der Lösung (Abbildung 2.32).

Die Numerik ist hier der Theorie jedoch voraus. So konnte die Konvergenz des zentralen Pfades gegen die Lösung bisher nur für den eingeschränkten Fall von steuerbeschränkten Problemen mit linear eingehender Steuerung gezeigt werden. Ende 2001 wurde damit begonnen, Resultate zur linearen Konvergenz von Innere-Punkte-Methoden für endlichdimensionale Lineare Programme auf Probleme der optimalen Steuerung zu übertragen.

Das Verfahren nutzt keine für gewöhnliche Differentialgleichungen spezifische Strukturen und eröffnet somit die Perspektive zur Anwendung auf partielle Differentialgleichungen. Dieses Projekt mündet in eine Kooperation mit der Arbeitsgruppe von F. Tröltzsch (TU) im Rahmen des Projekts A1 des beantragten DFG-Forschungszentrums “Mathematics for key technologies” ein.

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 Materialoptimie-

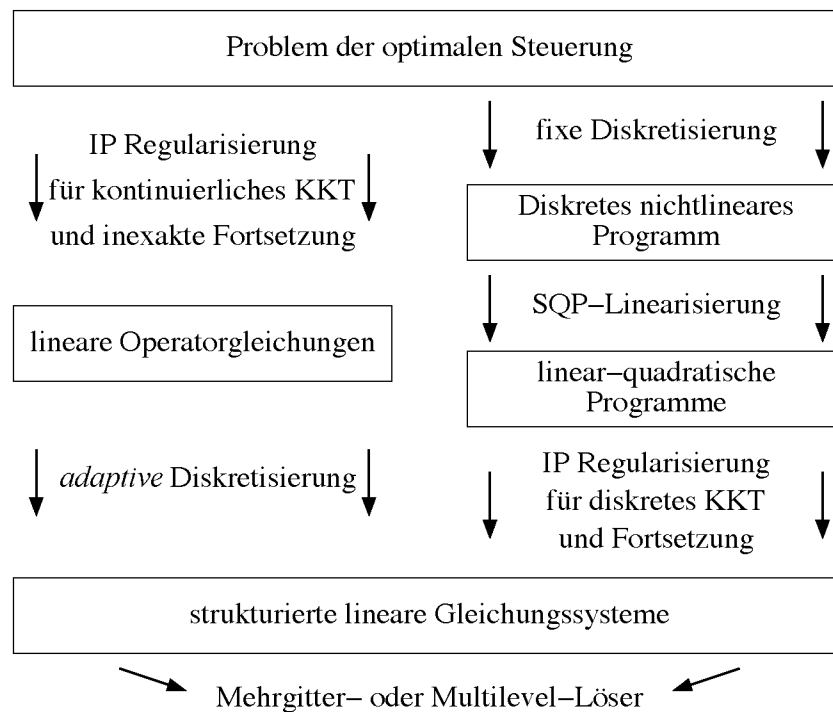


ABBILDUNG 2.31: Funktionenraumbasierter Komplementaritätsansatz (links) und existierende direkte Verfahren (rechts).

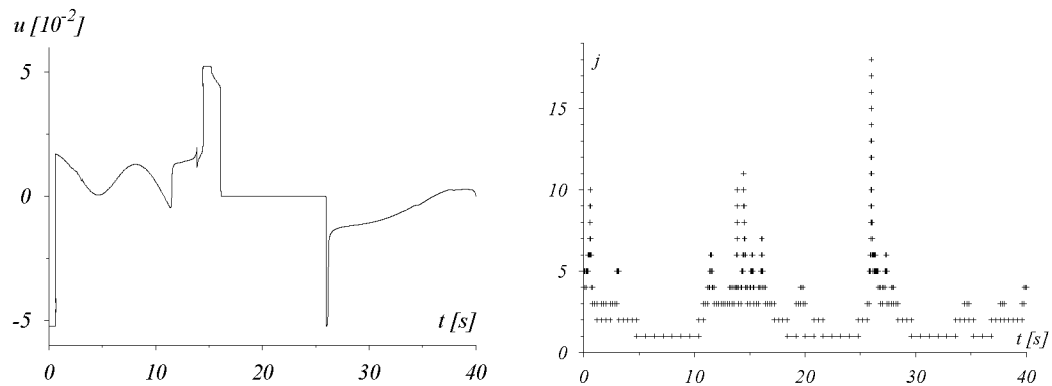


ABBILDUNG 2.32: Optimale Steuerung (links) und adaptive Gitterverfeinerung (rechts) für das Scherwind-Problem. Ohne analytische Vorarbeiten entdeckt das Komplementaritätsverfahren automatisch die komplizierte Schaltstruktur und verfeinert das Gitter an den relevanten Stellen (Unstetigkeiten der Steuerung, Start- und Endpunkte zustandsbeschränkter Teilbögen, . . .).

rung 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 semidefiniten 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* [7, 8] 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 untersucht, inwieweit sich dieses Verfahren auch zur Verbesserung semidefiniten Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme mittels primaler Schnittebenen eignet. Die zentralen Fragen dabei sind, ob sich trotz des dualen Zugangs primale Lösungen hinreichender Güte erzeugen lassen und unter welchen Bedingungen durch Hinzufügen verletzter Ungleichungen bezüglich der

so gewonnenen approximativen Primallösungen Konvergenz zur angestrebten Optimallösung erreicht wird. In [5] entwickelten wir eine Bündelmethode, deren korrekte Konvergenz gesichert ist, wenn das verwendete Separierungsorakel aus einer endlichen Menge an Ungleichungen stets die am meisten verletzte heraussucht. Dieses Ergebnis ist von großer praktischer Bedeutung für den in der kombinatorischen Optimierung oft verwendeten Ansatz der Lagrange-Relaxierung in Kombination mit Subgradientenverfahren.

Aufbauend auf der C++-Implementierung des spektralen Bündelverfahrens [4, 6] wurde eine praktische Variante dieses Schrittabenalgorithmus an semidefiniten Relaxierungen für Max-Cut und Graphenbisektion erprobt, die durch Separierung ungerader Kreis-Ungleichungen verbessert werden sollten. Die in [5] angeführten Ergebnisse zeigen, daß das Verfahren auch für praxisrelevante Instanzen auf Graphen mit bis zu 20000 Knoten noch durchführbar ist und zu sehr guten Schranken führen kann.

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: Förderschwerpunkt „Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“ des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF)

Eine zentrale Routineaufgabe jedes Gasversorgungsunternehmens ist die kurzfristige (operative) Planung der Lastverteilung im Leitungsnetz zur Deckung des aktuellen Bedarfs unter Beachtung technischer und vertraglicher Restriktionen. 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 Berichtsjahr wurden die Grundgleichungen der instationären Dynamik realer Gase untersucht und Möglichkeiten zur stabilen und bilanztreuen Diskretisierung (Finite-Differenzen-Verfahren) getestet, insbesondere im Hinblick auf geeignete Modellannahmen für die technische Optimierung langer Erdgas-Transportleitungen. Weiter wurden nichtlineare Modelle von Turbo-Verdichterstationen und von Regelventilen entwickelt, die zusammen mit den passiven Kopplungselementen das diskretisierte Gesamtnetz ergeben. Die Korrektheit des Modells wurde zusammen mit den industriellen Verbundpartnern Ruhrgas AG und PSI AG anhand typischer dynamischer Szenarien in einem Testnetz verifiziert (Verdichterausfall, Schaltvorgänge, periodische Fahrweise).

Den Schwerpunkt der weiteren Arbeiten bildet die Entwicklung und Implementierung strukturangepaßter nichtlinearer Optimierungsalgorithmen für den Fall fixierter Schaltvariablen. Als Unterprobleme in Branch-and-Bound-Verfahren sollen die Modelle dann später 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 stochastische Optimierung

Bearbeitet von: Marc Steinbach

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

Die üblichen primalen und dualen Dekompositionsmethoden zerlegen das mehrstufige Problem in kleinere Optimierungsprobleme, die den Pfaden oder (Clustern von) Knoten des Szenariobaums zugeordnet sind. Die entstehenden horizontalen bzw. vertikalen Kopplungsbedingungen werden iterativ behandelt, wobei in jeder Iteration die lokalen Probleme unabhängig gelöst werden.

Der neue rekursive Ansatz behandelt das Optimierungsproblem global mittels *SQP-Verfahren* und *Innere-Punkt-Methoden*. Er nutzt die Struktur des Szenariobaums auf der Ebene der linearen Algebra durch rekursives Lösen der indefiniten Karush-Kuhn-Tucker-Systeme. Bei iterativer Behandlung der Ungleichungsrestriktionen und Nichtlinearitäten wird hier die vertikale und horizontale Kopplung der Knoten explizit berücksichtigt [9, 10, 12].

Mit den in diesen Arbeiten sowie in [3, 11] gewonnenen theoretischen Erkenntnissen und praktischen Erfahrungen konnte im Berichtsjahr die Implementierung eines Softwaretools zur automatischen Erzeugung der problemspezifischen linearen Algebra in Angriff genommen werden. Entsprechend der spezifischen Besetzungsstruktur erzeugt dieser Codegenerator Datenstrukturen und Knotenoperationen als Quellcode in C++. Für ein finanzmathematisches Modell wird bereits die Effizienz des bestehenden (handoptimierten) kommerziellen Codes erreicht.

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 Profit und Risiko, erlaubt aber in der aktuellen Entscheidungsfindung eine wesentlich detailliertere Abbildung der erwarteten zukünftigen Marktentwicklung über mehrere Perioden hinweg.

In diesem Projekt werden die entstehenden *konvex-quadratischen mehrstufigen stocha-*

stischen Optimierungsprobleme theoretisch analysiert sowie hocheffiziente Lösungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Dies wird in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Unternehmensforschung der Universität St. Gallen durchgeführt, mit dem eine formelle Kooperation besteht.

In 2001 wurde das Modell um Devisentermingeschäfte zur Absicherung des Währungsrisikos erweitert, da es um sehr große Anlagebeträge geht. Eine neu konzipierte Implementierung erleichtert eventuelle zukünftige Modelländerungen und reduziert zugleich die Rechenzeit um 30%. Besondere Schwierigkeiten entstehen einerseits durch die Größe der Optimierungsprobleme, andererseits durch die Tatsache, daß die Lösungen *hochgradig degeneriert* sind [11]. Die algorithmische Behandlung basiert auf der Ausnutzung problemspezifischer Sparse-Strukturen und auf den inhärenten Regularisierungseigenschaften von Innere-Punkt-Methoden [9, 10, 12]. Eine kommerzielle Version des eigens entwickelten C++-Codes ist seit Ende 1999 bei einer Schweizer Versicherungsgesellschaft erfolgreich im Praxiseinsatz. Der Code löst Probleme mit mehreren 10000 Szenarien und ein bis zwei Millionen primalen Variablen auf einem PC.

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 (DFG)

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*).

Im Rahmen dieser Verfahrensklasse wurde im Projekt ein neuer Ansatz untersucht, 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. Die Untersuchungen beziehen sich auf ein Anwendungsproblem, das auch im Partnerprojekt behandelt wird: die Steuerung eines kontinuierlichen Destillationsprozesses mit zufälligem Feedstrom. Hierzu wurden mittels eines stochastischen Trackingansatzes Vergleiche mit dem alternativen Ansatz probabilistischer Beschränkungen durchgeführt [3]. Zur Lösung der entstehenden extrem großen stochastischen Optimierungsprobleme wird eine primal-duale Innere-Punkt-Methode mit direkter Faktorisierung der Karush-Kuhn-Tucker-Systeme eingesetzt [9, 10, 12]. Die Rechenzeit konnte durch eine pro-

blemspezifische Implementierung sowie durch (ebenfalls problemspezifische) heuristische Techniken zur Konvergenzbeschleunigung um den Faktor sechs reduziert werden, so daß Trackingprobleme mit bis zu 3 Millionen Variablen in wenigen Minuten auf einem PC gelöst werden. Hierdurch rückt auch die Echtzeit-Lösung eines integrierten Modells für ein Flash-Unit-System unter Einbeziehung der nichtlinearen Prozeßdynamik in den Bereich des Möglichen. Ein solches Optimierungsmodell wurde ebenfalls entwickelt und weitgehend implementiert.

Publikationen

- [1] P. Deuffhard und F. Bornemann, *Numerische Mathematik II. Gewöhnliche Differentialgleichungen*, 2. vollständig überarbeitete und erweiterte Auflage, de Gruyter, 2002.
- [2] ———, *Scientific Computing with Ordinary Differential Equations*, Texts in Applied Mathematics, Springer, 2002.
- [3] I. Garrido und M. C. Steinbach, *A Multistage Stochastic Programming Approach in Real-Time Process Control*, Online Optimization of Large Scale Systems (M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, Hrsg.), Springer, 2001, S. 479–498.
- [4] C. Helmberg, *SBmethod—A C++ Implementation of the Spectral Bundle Method*, Manual to Version 1.1, Report 00-35, ZIB, 2000.
- [5] ———, *A Cutting Plane Algorithm for Large Scale Semidefinite Relaxations*, Report 01-26, ZIB, 2001.
- [6] ———, *Numerical Evaluation of SBmethod*, Report 01-37, ZIB, 2001.
- [7] C. Helmberg und K. C. Kiwiel, *A spectral bundle method with bounds*, Report SC-99-37, ZIB, 1999, überarbeitet 2001, erscheint in Math. Programming.
- [8] C. Helmberg und F. Rendl, *A spectral bundle method for semidefinite programming*, SIAM J. Optim. **10** (2000), Nr. 3, 673–696.
- [9] M. C. Steinbach, *Recursive Direct Algorithms for Multistage Stochastic Programs in Financial Engineering*, Operations Research Proceedings 1998 (P. Kall und H.-J. Lüthi, Hrsg.), Springer, 1999, S. 241–250.
- [10] ———, *Hierarchical Sparsity in Multistage Convex Stochastic Programs*, Stochastic Optimization: Algorithms and Applications (S. P. Uryasev und P. M. Pardalos, Hrsg.), Kluwer Academic Publishers, 2001, S. 385–410.
- [11] ———, *Markowitz Revisited: Mean-Variance Models in Financial Portfolio Analysis*, SIAM Review **43** (2001), Nr. 1, 31–85.
- [12] ———, *Tree-Sparse Convex Programs*, Report 01-08, ZIB, 2001.

- [13] M. Weiser, *Function Space Complementarity Methods for Optimal Control Problems*, Dissertation, FU Berlin, 2001.
- [14] M. Weiser, P. Deuffhard, *The Central Path towards the Numerical Solution of Optimal Control Problems*, Report 01-12, ZIB, 2001 (eingereicht).

2.2.8 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.

Viele Probleme aus Bereichen wie z. B. Telekommunikation oder Verkehr lassen sich als sogenannte gemischt-ganzzahlige lineare Programme (MIPs) formulieren.

Um diese zu lösen, gibt es zwei grundlegende Ansätze. Zum einen können die speziellen Struktureigenschaften des Problems ausgenutzt werden, um einen Lösungsalgorithmus für das vorliegende Problem zu entwickeln. Dies geschieht vorwiegend in anderen Schwerpunkten wie z. B. Telekommunikation oder Verkehr. Zum anderen kann man versuchen, MIPs mittels eines allgemeinen von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus zu lösen.

Auf Grund der vielfältigen Probleme und der Dynamik der technischen Entwicklung wird es zunehmend wichtig, akzeptable Lösungen für auftauchende Probleme schnell zu finden. Hierfür eignet sich der allgemeine Ansatz hervorragend. Oft gelingt es, reale Probleme bereits auf diese Weise zufriedenstellend zu lösen.

In diesem Rahmen ordnen sich die Projekte des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* wie folgt ein:

- *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*
verbessert die Algorithmen zur allgemeinen Lösung von MIPs.
- *Modellierungssprache Zimpl*
beschleunigt die Umsetzung vom mathematischen Modell zum MIP.
- *Kombinatorische Relaxierungen*
leiten aus speziellen Problemen Verallgemeinerungen ab.

Gemischt-Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Tobias Pfender, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt)

Ein *Gemischt-Ganzzahliges Programm* (Mixed Integer Program, MIP) besteht aus einer linearen Zielfunktion und linearen Nebenbedingungen, wobei zusätzlich von einigen Variablen Ganzzahligkeit gefordert wird. Sehr viele kombinatorische Optimie-

rungsprobleme lassen sich als MIP formulieren. Algorithmen zur Lösung solcher MIPs sind daher vielseitig einsetzbare Optimierungswerkzeuge.

Der bisher erfolgreichste Ansatz besteht im Einsatz eines sogenannten *Branch-and-Cut*-Verfahrens unter Verwendung der LP-Relaxierung. Dabei werden die Ganzzahligkeitsbedingungen zunächst relaxiert, so daß sich das MIP zu einem *Linearen Programm* (LP) vereinfacht. Aus der Lösung dieser LP-Relaxierung wird anschließend die Ganzzahligkeit unter Verwendung von Schnittebenen (Cuts) sowie einer impliziten Enumeration durch Branch-and-Bound wiederhergestellt.

Alexander Martin hat im Zuge seiner Habilitationsschrift [4] am ZIB den Branch-and-Cut-Code SIP entwickelt, der zur Lösung der LPs den CPLEX LP-Löser verwendet und sich in seiner Leistungsfähigkeit mit den kommerziellen Codes messen kann.

In diesem Jahr wurden einige Erweiterungen und Verbesserungen in SIP implementiert, die zu einer beachtlichen Geschwindigkeitssteigerung geführt haben. Insbesondere wurde die Branching-Strategie in [5] eingehend untersucht und verbessert. Zusätzlich trugen Veränderungen in der Knotenauswahl und in den Primalheuristiken dazu bei, die Geschwindigkeit von SIP zu erhöhen.

In Tabelle 2.1 sind die Ergebnisse auf einigen Instanzen der MIPLIB (<http://www.caam.rice.edu/~bixby/miplib/miplib.html>) aufgeführt. Es werden die Anzahl der benötigten Branch-and-Bound-Knoten sowie die Laufzeit in Sekunden verglichen. SIP 1.1 ist die Originalversion von Alexander Martin, SIP 1.2 ist die Version nach den diesjährigen Modifikationen. Als zusätzlicher Vergleich sind die Ergebnisse von CPLEX 7.5 mit Standard-Parametereinstellungen angegeben. Die Rechnungen wurden auf einer Alpha 21264 (750 Mhz) mit 2 Gigabyte Hauptspeicher durchgeführt.

Modellierungssprache Zimpl

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Zimpl ist eine Programmiersprache, um das mathematisches Modell eines Anwendungsproblems in ein lineares (LP) oder gemischt-ganzzahliges Programm (MIP) zu übersetzen. Das Ergebnis wird als MPS-Datei (siehe <http://www6.software.ibm.com/sos/features/featur11.htm>) oder LP-Datei [8] geschrieben und kann dann von gängigen LP-Lösern z.B. SoPlex (siehe Abschnitt 6.12) und MIP-Lösern (siehe Projekt *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*) verarbeitet werden.

Das links stehende lineare Programm läßt sich in Zimpl wie rechts angegeben schreiben:

$\begin{array}{ll} \min & 2x + 3y \\ \text{subject to} & x + y \leq 6 \\ & x, y \geq 0 \end{array}$	<pre> var x; var y; minimi- ze cost: 2 * x + 3 * y; subto c0: x + y <= 6; </pre>
---	---

Man erhält dann die zugehörige MPS-Datei:

Problem	SIP 1.1		SIP 1.2		CPLEX 7.5	
	Knoten	Zeit	Knoten	Zeit	Knoten	Zeit
10teams	246	25.4	235	76.8	3603	81.2
air04	938	171.1	294	143.3	748	113.5
air05	1558	169.4	889	206.4	689	103.2
bell3a	25768	12.8	24592	12.5	24184	19.7
bell5	163758	83.3	49073	21.1	659301	289.8
blend2	8465	13.3	3379	8.9	1883	2.2
cap6000	4812	84.0	4562	80.2	12084	251.6
gesa2	137609	427.8	43649	149.3	141	1.5
gesa2_o	245751	744.3	93065	301.4	1166	5.3
misc07	95595	364.8	50763	263.9	111858	226.4
mitre	77	10.1	8	8.3	90	7.2
mod011	5760	142.8	3649	153.0	7877	3070.8
nw04	29	45.0	26	59.8	66	11.8
p2756	1444	53.8	98	7.2	26	1.0
pk1	446226	1362.8	388738	764.7	347912	198.6
pp08a	246207	490.4	72353	103.2	491	2.5
pp08aCUTS	596593	1813.2	88235	141.4	1461	5.3
qiu	21020	379.9	19955	511.0	41557	919.6
qnet1_o	639	11.9	148	11.5	54	3.0
rout	709494	3600.0	19118	109.4	223250	3600.0
stein45	47201	88.2	50823	87.6	74486	46.3
vpm2	31062	31.3	19548	23.4	7910	5.8
Summe (22)	2790252	10125.7	933200	3244.2	1520837	8966.4

Tabelle 2.1: Benötigte Branch-and-Bound-Knoten und Laufzeit in Sekunden der alten und neuen SIP-Version sowie von CPLEX 7.5 mit Standardparametern. Das Problem „rout“ konnte sowohl von SIP 1.1 als auch von CPLEX 7.5 nicht in der vorgegebenen Zeit von 3.600 Sekunden gelöst werden.

```

NAME          ex1.mps
ROWS
  N  OBJECTIV
  L  c0
COLUMNS
  x      OBJECTIV      2
  x      c0             1
  y      OBJECTIV      3
  y      c0             1
RHS
  RHS   c0             6
ENDATA

```

Zimpl wurde bereits in zwei Projekten und einer Vorlesung erfolgreich eingesetzt. Es

fehlen im Vergleich zu kommerziellen Modellierungssprachen wie z. B. AMPL ([7]) noch viele Fähigkeiten. Wir hoffen, dies in Zukunft zumindest in Teilbereichen zu ändern. Der Hauptgrund für die Entwicklung von Zimpl ist der Wunsch, ein Programm zu haben, das für bestimmte Untersuchungen einfach und individuell angepaßt und geändert werden kann. Dies ist bei den kommerziellen Modellierungssprachen leider kaum möglich, da der Quellcode nicht erhältlich ist. Darüberhinaus planen wir Erweiterungen der Modellierungsmöglichkeiten für spezielle Problemklassen und eine Integration mit anderen Werkzeugen, die innerhalb des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* entwickelt werden.

Zimpl ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/zimpl>.

Kombinatorische Relaxierungen

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer

Kooperationspartner: Robert Weismantel (Universität Magdeburg)

Kombinatorische Relaxierungen sind polyedrische Einbettungen von kombinatorischen Optimierungsproblemen in andere kombinatorische Optimierungsprobleme. Sie erlauben die Übertragung von Ungleichungen und Separierungsverfahren von einem (gut untersuchten) Problem auf ein anderes, noch zu untersuchendes. Ein typisches Beispiel für solche Techniken ist die Übertragung von Kreisungleichungen und des zugehörigen Separieralgorithmus für das Stabile-Mengen-Problem auf andere kombinatorische Optimierungsprobleme, mit der man eine ganze Reihe bekannter Ungleichungen aus der polyedrischen Kombinatorik, 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, zu größeren, polynomial separierbaren Klassen verallgemeinern kann. Kombinatorische Relaxierungen werden in [2], [3] und [1] diskutiert.

Wir studieren gegenwärtig kombinatorische Relaxierungen einer Klasse von kombinatorischen Optimierungsproblemen, die wir als Probleme des „Packens kombinatorischer Strukturen“ sehen. Diese Probleme haben eine Blockdiagonalstruktur aus individuellen kombinatorischen Optimierungsproblemen, die durch Packungsbedingungen miteinander gekoppelt sind. Das Steinerbaum-Packungsproblem, das Färbungsproblem und auch viele Probleme des Packens von Wegen, wie zum Beispiel das Mehrgüterflußproblem oder das Dienstplanungsproblem im öffentlichen Verkehr, gehören zu dieser Klasse.

Kombinatorische Packungsprobleme haben eine kanonische Relaxierung als Stabile-Mengen-Problem, die man durch eine Dantzig-Wolfe-Dekomposition bzw. einen Spaltengenerierungs-Ansatz erhält. Diese Relaxierung hat Eigenschaften, die sie zu einer potentiell interessanten Quelle von Ungleichungen für das Ausgangsproblem machen. Man kann zum Beispiel zeigen, daß Packungsprobleme von genau zwei kombinatorischen Strukturen auf Stabile-Mengen-Relaxierungen führen, deren assoziierter Graph perfekt ist. Unter Umständen überträgt sich auch die Ganzzahligkeit der indi-

viduellen Probleme auf das Packungsproblem, wie etwa beim Packen von Matroiden. Im allgemeinen Fall kann man die Stabile-Mengen-Relaxierung zur Konstruktion polynomial separierbarer Ungleichungen nutzen.

SteinLib Testdata Library

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt), Stefan Voß (Technische Universität Braunschweig)

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 mit minimalem Gewicht gesucht. Hierbei sind auch Varianten möglich, z. B. das Steinerarboreszenzproblem, bei dem in einem gerichteten Graphen $D = (V, A, c)$ eine T aufspannende Arboreszenz mit Wurzel $r \in T$ gesucht wird.

Beim Gruppensteinerbaumproblem sind disjunkte Mengen $T_i \subseteq V$ gegeben; die Lösung ist ein 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 eine spezielle Struktur haben, 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 beständig aktualisiert und erweitert. Eine Veröffentlichung zu den enthaltenen Instanzen ist in [6] erschienen.

Derzeit sind 1.319 verschiedene Steinerbaumprobleminstanzen in 47 Gruppen online verfügbar. Wir streben an, die Bibliothek zunehmend als Standard für Veröffentlichungen zur Lösung von Steinerbaumproblemen zu etablieren.

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, *Set packing relaxations of some integer programs*, *Mathematical Programming* **88** (2000), 425–450.
- [3] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Discrete relaxations of combinatorial programs*, *Discrete Applied Mathematics* **112** (2001), Nr. 1–3, 11–26.
- [4] A. Martin, *Integer Programs with Block Structure*, Habilitationsschrift, TU-Berlin, 1998.

- [5] T. Pfender, *Anwendung von Neuronalen Netzen zur Beschleunigung von Branch&Bound-Verfahren der Kombinatorischen Optimierung*, Diplomarbeit, Fachbereich Informatik, TU-Berlin, 2001.
- [6] T. Koch, A. Martin und S. Voß, *SteinLib: An Updated Library on Steiner Tree Problems in Graphs*, in D.-Z. Du, X. Cheng (Hrsg.): *Steiner Trees in Industries*, 285–325, Kluwer, 2001.
- [7] R. Fourier, D. M. Gray, and B. W. Kernighan. *AMPL: A Modelling Language for Mathematical Programming*, boyd & fraser publishing company, Danvers, Massachusetts, 1993.
- [8] *ILOG CPLEX 7.0 Reference Manual*, ILOG, 2000.

2.2.9 Diskrete Strukturen

Bei der mathematischen Untersuchung von Algorithmen erweist sich die Kenntnis möglichst vieler Eigenschaften der zugrundeliegenden diskreten Strukturen als nützlich. In der kombinatorischen Optimierung 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 und für diesen Graphentyp das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösen kann. Die Untersuchung perfekter Graphen motiviert andererseits interessante grundlagentheoretische Fragestellungen und Konzepte in Graphentheorie, Ganzzahliger Programmierung und Informationstheorie.

Weitere spezielle Graphen sind Bäume. Mit Hilfe der *Baumweite* kann die Ähnlichkeit eines Graphen zu einem Baum ausgedrückt werden. Es hat sich herausgestellt, daß viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme für Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomialer Zeit lösbar sind. Jedoch ist die Bestimmung der Baumweite selbst ein NP-schweres Problem. Um obige Verfahren für Graphen mit beschränkter Baumweite in der Praxis einsetzen zu können, müssen daher zunächst effiziente Heuristiken und untere Schranken zur Bestimmung der Baumweite entwickelt werden.

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 zu Topologie, Algebra und Geometrie.

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

absichtigt, Software-Komponenten aus dem Projekt *Polyedrische Untersuchung* zum schnelleren Auffinden eckenminimaler Triangulierungen höherdimensionaler Mannigfaltigkeiten einzusetzen.

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 (HU Berlin)

Förderung: Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

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 [5]. Das *Stabile-Mengen-Problem*, die Bestimmung einer stabilen Menge größter Kardinalität oder maximalen Gewichts im Graphen, ist jedoch i. a. NP-schwer. Ein Lösungsansatz besteht darin, das Stabile-Mengen-Problem als lineares Programm über dem *Stabile-Mengen-Polytop*, der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen, aufzufassen. Die dazu nötige Beschreibung der Facettenmenge des Polytops ist für die meisten Graphenklassen allerdings nicht bekannt.

Für *perfekte Graphen* ist das Stabile-Mengen-Problem in polynomialer Zeit lösbar [9]. Das Stabile-Mengen-Polytop perfekter Graphen ist durch Nichtnegativitäts- und Cliquebedingungen vollständig beschrieben. Der Algorithmus für das Stabile-Mengen-Problem perfekter Graphen beruht auf einem polynomialen Separationsverfahren für eine Klasse von Ungleichungen, die alle Cliquebedingungen enthalten. Derartige Schnittebenenverfahren [10] haben sich in der Praxis als nützlich erwiesen, um Stabile-Mengen-Probleme exakt bzw. mit akzeptabler Gütegarantie zu lösen (siehe Projekt *Kombinatorische Relaxierungen* und [5, 6]). Unser Ziel ist es, 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 extremale perfekte Graphen und Oberklassen perfekter Graphen: Zum einen verfolgen wir das Konzept *kritischer Kanten* in perfekten Graphen, deren Entfernen zum Verlust der Perfektheit führt. Wir untersuchen verschiedene Fragestellungen im Zusammenhang kritischer Kanten, z. B. in welchen perfekten Graphen kritische Kanten und kritische Kantenordnungen auftreten [27, 29, 30, 31]. Weiter interessieren wir uns dafür, „wie imperfekt“ Graphen sind, die durch Entfernen kritischer Kanten aus perfekten Graphen entstehen. Um verschiedene Stufen der Imperfektheit eines Graphen zu unterscheiden, führten wir zwei Oberklassen perfekter Graphen ein. Dazu relaxieren wir den Perfektheitsbegriff bzgl. der Facettenmenge des Stabile-Mengen-Polytops: wir verallgemeinern Cliquebedingun-

gen durch andere Ungleichungen und betrachten die Graphen, deren Stabile-Mengen-Polytop durch Nichtnegativitätsbedingungen und die betrachteten Ungleichungen beschrieben ist [10]. Eine natürliche Verallgemeinerung von Cliquebedingungen sind sog. Rangbedingungen, eine weitere Verallgemeinerung stellen geliftete Rangbedingungen dar. Zwei Oberklassen perfekter Graphen bestehen aus allen *rang-perfekten Graphen* (deren Stabile-Mengen-Polytop durch Nichtnegativitäts- und Rangbedingungen gegeben ist) und allen *schwach rang-perfekten Graphen* (deren Stabile-Mengen-Polytop durch Nichtnegativitäts- und bestimmte geliftete Rangbedingungen beschrieben ist) [29]. In der Literatur sind bereits einige Klassen rang-perfekter und schwach rang-perfekter Graphen bekannt, ein Überblick über den gegenwärtigen Kenntnisstand ist in [33] zu finden. Darüber hinaus wurde für einige imperfekte Graphen, die aus perfekten Graphen durch Entfernen kritischer Kanten entstehen, die Zugehörigkeit zur Klasse der (schwach) rang-perfekten Graphen untersucht [28, 29, 32].

Eine informationstheoretische Oberklasse perfekter Graphen bilden die *normalen Graphen*, basierend auf schwacher Additivität der Graph-Entropie (einem informationstheoretischen Funktional, das Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf Stabile-Mengen-Polytopen von Graphen untersucht). Wie sich diese Erweiterung des Perfektheitsbegriffes graphen- bzw. polyedertheoretisch auswirkt und welche Bedeutung dabei den Wahrscheinlichkeitsverteilungen zukommt, wird im Rahmen der im Berichtszeitraum neu eingerichteten DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“ untersucht.

Baumweite und Kombinatorische Optimierung

Bearbeitet von: Arie Koster

Kooperationspartner: Hans Bodlaender, Frank van den Eijkhof, Linda van der Gaag (Universität Utrecht, Niederlande); Stan van Hoesel (Universität Maastricht, Niederlande)

Viele kombinatorische Optimierungsaufgaben enthalten einen Graphen als unterliegende Struktur. Weisen die unterliegenden Graphen besondere Eigenschaften auf, können diese speziellen Strukturen häufig zur effizienteren Lösung der Probleme ausgenutzt werden. Ist der unterliegende Graph z. B. ein Baum, sind auch i. a. NP-schwere Optimierungsprobleme leicht lösbar.

Mit Hilfe von *Baumzerlegungen* eines Graphen kann die Ähnlichkeit des Graphen zu einem Baum ausgedrückt werden. Die *Weite* einer Baumzerlegung stellt hierbei das Maß für die Ähnlichkeit dar. Für einen Graphen wird die minimale Weite einer solchen Zerlegung als seine *Baumweite* bezeichnet.

Es hat sich herausgestellt, daß viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme für Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomialer Zeit lösbar sind [3]. Bis vor kurzem wurde angenommen, daß diese Resultate nur einen theoretischen Wert haben, da die Baumweite im Exponenten der Algorithmenlaufzeit erscheint. Anhand eines Frequenzzuweisungsproblems konnte jedoch gezeigt werden [13], daß sich solch ein Algorithmus zur Bestimmung einer optimalen Lösung von kombinatorischen Op-

timierungsproblemen in der Praxis nutzen läßt. Zusätzlich hat sich die Baumzerlegung zur Berechnung der sogenannten „exact inference“ in probabilistischen Netzen bewährt [16].

Auf Baumzerlegungen basierende Verfahren bestehen aus zwei Schritten: (i) die Konstruktion einer Baumzerlegung des zugrundeliegenden Graphen, entlang der dann (ii) mittels dynamischer Programmierung eine optimale Lösung des Ausgangsproblems berechnet wird. Während im ersten Schritt ein von der Anwendung unabhängiges Graphenproblem zu lösen ist, erfordert der zweite Schritt die Entwicklung eines auf die spezifische Aufgabenstellung zugeschnittenen Verfahrens.

Im Berichtszeitraum lag das Hauptaugenmerk zunächst auf der effizienten Berechnung guter Baumzerlegungen. Dabei standen vor allem zwei Aspekte im Vordergrund. Einerseits wurden Methoden zur geeigneten Vereinfachung von Graphen entwickelt, andererseits sind effizient berechenbare Heuristiken und untere Schranken hergeleitet worden.

Die zur Graphvereinfachung abgeleiteten Regeln wurden auf probabilistische Netze angewandt, deren Ursprung im medizinischen Bereich liegt (vgl. [4]). Sie erlauben meist umfangreiche Reduktionen der Problemgröße, wodurch die Konstruktion einer Baumzerlegung entscheidend erleichtert und in einigen Instanzen sogar komplett gelöst wird.

Zur Lösung von Frequenzzuweisungsproblemen wurde in [13] eine erste Heuristik entwickelt und eine untere Schranke hergeleitet. Bei der praktischen Anwendung stellte sich jedoch heraus, daß dies häufig zu einer Baumzerlegung mit schlecht abschätzbarer Güte führte. Infolgedessen wurden in [14] weitere Heuristiken erarbeitet, die auf der Verknüpfung zwischen Baumweite und einer Triangulierung eines Graphen basieren. Gleichzeitig konnte auch die untere Schranke verbessert werden. Im Resultat ergab der Vergleich auf zahlreichen Instanzen aus unterschiedlichen Anwendungen (Frequenzzuweisung, Graphfärbung und probabilistische Netze), daß damit zwar eine bessere Güteabschätzung erreicht werden kann, diese jedoch noch immer nicht zufriedenstellend ist.

Aus diesem Anlaß wurde gemeinsam mit den Kooperationspartnern im letzten Jahr bei der NWO (Niederländische Organisation für Wissenschaft und Forschung) ein Projekt beantragt, um die Verfahren zur Bestimmung der Baumweite und -zerlegung ebenso wie ihren Einsatz zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme weiterzuentwickeln. Im Rahmen dieses Projektes werden zwei Doktoranden ihre Arbeit an diesem Thema in 2002 aufnehmen.

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 Punktconfigurationen sind Zerlegungen der konvexen Hülle einer endlichen Punktmenge im euklidischen Raum in endlich viele Polytope, deren Ecken in der gegebenen Punktconfiguration liegen. Sind alle Polytope Simplexe, so spricht man von Triangulierungen. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können, erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [21]. 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 1997–2000 eine Reihe von theoretischen Resultaten erzielt werden konnte (mittlerweile publiziert in [1, 7, 11, 26, 25]), steht seit 2000 die Weiterentwicklung des Programmpakets TOPCOM [22, 23] im Mittelpunkt. In 2001 wurde TOPCOM um eine wichtige Funktion erweitert: es lassen sich nun neben expliziten kombinatorischen Berechnungen mit Triangulierungen von Punktconfigurationen auch reguläre Triangulierungen untersuchen. Hierzu wird der LP-Löser aus dem `cdd`-Paket von Komei Fukuda mit exakter Arithmetik verwendet [8].

Elemente der TOPCOM-C++-Bibliothek für Berechnungen in Simplizialkomplexen haben im Projekt *Kombinatorische Mannigfaltigkeiten* die Flip-Heuristik zur Suche minimaler Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten bereits um den Faktor zwanzig beschleunigt. Weitere Verbesserungen werden erwartet.

Dieses Projekt soll mit der Fertigstellung eines Lehrbuches zusammen mit Jesús De Loera und Francisco Santos abgeschlossen werden. Ein Vorlesungsskriptum (in deutsch) zu einer Lehrveranstaltung an der TU Berlin ist bereits erhältlich [24].

Triangulierte Mannigfaltigkeiten

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

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

In den Anfangszeiten der Topologie wurden Mannigfaltigkeiten vielfach anhand ihrer Triangulierungen untersucht. Insbesondere die Berechnung von Invarianten nutzte die zugrundeliegende kombinatorische Struktur, während hierfür später zunehmend algebraische Methoden Einzug fanden. Obgleich es sich herausstellte, daß nicht jede topologische Mannigfaltigkeit notwendigerweise triangulierbar ist, gilt seit dem Aufkommen von Computern den kombinatorischen Aspekten von Mannigfaltigkeiten und ihren Triangulierungen erneut großes Interesse. 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 Anzahl der Ecken oder die Summe aller Seiten einer Triangulierung als zu minimierende Zielfunktion, dann erlaubt der Einsatz von Simulated-Annealing, kleine – und in einigen Fällen sogar eckenminimale – Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten zu erzielen. Explizite Beispiele konnten unter Verwendung des Programms BISTELLAR [18] gewonnen werden [2, 15, 17].
- Systematischer in der Herangehensweise, wenn auch exponentiell in der Berechnung, ist, Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig zu enumerieren. Dies wurde beispielsweise für eckentransitive Triangulierungen mit bis zu 13 Ecken (in allen dabei möglichen Dimensionen) durchgeführt, wobei viele bekannte wieder, aber auch einige interessante Beispiele neu entdeckt wurden [12, 17]. Im Jahr 2001 konnte das hierfür verwendete Enumerationsprogramm massiv um einen Faktor tausend beschleunigt werden, indem zum Abschneiden des Enumerationsbaumes Stanleys „Upper Bound Theorem“ eingesetzt wurde, durch welches die maximale Anzahl von Facetten einer simplizialen $(d-1)$ -Sphäre als möglicher Eckenlink auf $n-1$ Ecken beschränkt ist. Neu gefunden werden konnten so z. B. eckentransitive Triangulierungen der Poincaréschen Homologie-3-Sphäre auf 17 Ecken mit zyklischer Gruppenwirkung.

Auf bistellaren Flips basierendes Simulated-Annealing hat sich im Verlauf der Untersuchungen als eine erfolgreiche Heuristik zum Erkennen des Homöomorphietyps einer Mannigfaltigkeit erwiesen. Dabei werden auf ein Testobjekt so lange bistellare Operationen angewandt, bis der resultierende Komplex letztendlich kombinatorisch isomorph zu einer „Referenztriangulierung“ einer bekannten Mannigfaltigkeit ist. Als Implementation ist das Programm BISTELLAR_EQUIVALENT [19] erhältlich.

Im Laufe des Jahres 2001 wurden die Methoden zum Ermitteln des Homöomorphietyps von triangulierten Mannigfaltigkeiten erheblich verfeinert, und es gelang erstmals, den topologischen Typ von mehrfach zusammenhängenden Summen von 3-Mannigfaltigkeiten zu bestimmen. Dazu wurden explizit direkte Summenzerlegungen und Henkelreduktionen (siehe die Abbildungen 2.33 und 2.34) auf simplizialer Ebene durchgeführt. Insbesondere konnte so das kombinatorische Instrumentarium um zwei weitere topologische Standard-Verfahren ergänzt werden.

Das im Jahr 2001 erzielte Material findet in Form von drei Kapiteln Eingang in die zur Zeit sich in Fertigstellung befindende Springer Lecture Note in Mathematics mit dem Titel „Triangulated Manifolds with Few Vertices“. Die zugehörigen Datensammlungen sind erhältlich unter [20].

Publikationen

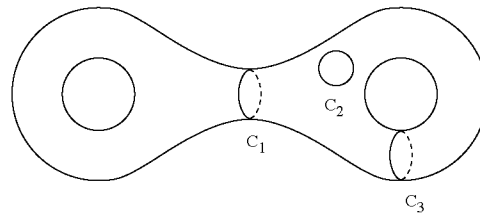


ABBILDUNG 2.33: Trennende und nicht-trennende Sphären.

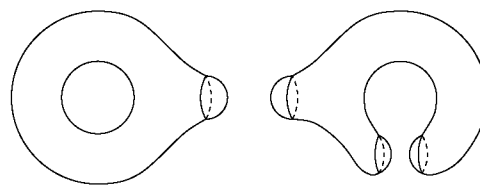


ABBILDUNG 2.34: Direkte Summenzerlegung und Henkelreduktion.

- [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] H. L. Bodlaender, *A Tourist Guide through Treewidth*, Acta Cybernetica **11**, Nr. 1–2 (1993), 1–21.
- [4] H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster, F. van den Eijkhof und L. C. van der Gaag, *Pre-processing for Triangulation of Probabilistic Networks*, Report 01-39, ZIB, 2001.
- [5] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [6] _____, *Combinatorial Packing Problems*, erscheint in: Festschrift in honor of Manfred Padberg's 60th birthday
- [7] P. Edelman, V. Reiner und J. Rambau, *On subdivision posets of cyclic polytopes*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 85–101.

- [8] K. Fukuda, *cdd*, <http://www.ifor.math.ethz.ch/~fukuda/cdd\protect\unhbox\voidb@x\kern.06em\vbox{\hrulewidth.3em}home/cdd.html>, 2001.
- [9] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [10] ———, *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*, Springer, Berlin, 1988.
- [11] 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.
- [12] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Combinatorial manifolds with transitive automorphism group on few vertices*, Manuskript, 1999.
- [13] A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment – Models and Algorithms*. Dissertation, Universität Maastricht, 1999, elektronisch erhältlich unter <http://www.zib.de/koster/thesis.html>.
- [14] A. M. C. A. Koster, H. L. Bodlaender und C. P. M. van Hoesel, *Treewidth: Computational Experiments*, Report 01-38, ZIB, 2001.
- [15] W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, *Periodica Mathematica Hungarica* **39** (1999), 161–183.
- [16] S. J. Lauritzen und D. J. Spiegelhalter, *Local computations with probabilities on graphical structures and their application to expert systems*, *The Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* **50** (1988), 157–224.
- [17] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, *Berichte aus der Mathematik*, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [18] ———, *GAP-program BISTELLAR*, Second version 02/99 (First version 11/97 by A. Björner, F. H. Lutz.), online¹ erhältlich, 1999.
- [19] ———, *GAP-program BISTELLAR-EQUIVALENT*, Version 02/99, online² erhältlich, 1999.
- [20] ———, *The Manifold Page*, online³, 2000.

¹<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/BISTELLAR>

²<http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/BISTELLAR-EQUIVALENT>

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

- [21] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [22] _____, *TOPCOM—Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software unter der Gnu Public Licence, <http://www.zib.de/rambau/TOPCOM.html>, 1999–2001.
- [23] _____, *Point configuration and a triangulation without flips as constructed by Santos*, Electronic Geometry Model Nr. 2000.08.005, 2000, <http://www.eg-models.de/>.
- [24] _____, *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern*, Report 00-46, ZIB, 2000, Vorlesungsskript, Technische Universität Berlin.
- [25] _____, *Circuit admissible triangulations of oriented matroids*, Discrete & Computational Geometry **27** (2002), 155–161.
- [26] J. Rambau und F. Santos, *The Generalized Baues Problem for cyclic polytopes I*, European Journal of Combinatorics **21** (2000), 65–83.
- [27] A. Wagler, *On Critically Perfect Graphs*, Journal of Graph Theory **32** (1999), 394–404.
- [28] _____, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, Discrete Applied Mathematics **95** (1999), 455–466.
- [29] _____, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Cuvillier, Göttingen, 2000, Dissertation, TU Berlin.
- [30] _____, *The Classes of Critically and Anticritically Perfect Graphs*, Report 00-29, ZIB, 2000.
- [31] _____, *Critical and Anticritical Edges in Perfect Graphs*, Proceedings of the 27th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science (Boltenhagen), Lecture Notes in Computer Science **2204**, Springer (2001), 317–327.
- [32] _____, *Rank-Perfect and Weakly Rank-Perfect Graphs*, Report 01-18, ZIB, 2001, erscheint in: Mathematical Methods of Operations Research.
- [33] _____, *Relaxing Perfectness: Which Graphs are Almost Perfect?*, Report 02-03, ZIB, 2002, erscheint in: Festschrift in honor of Manfred Padberg's 60th birthday

2.2.10 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 der von uns entwickelten 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. Die vertiefte Behandlung von Themen aus diesem Schwerpunkt wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “Mathematics for key technologies” erfolgen (Teilprojekte B3 und B4).

Tools zur Performanceanalyse von Telekommunikationsnetzen mit Mobil- und Festnetzteilnehmern

Bearbeitet von: Manfred Brandt

Kooperationspartner: Andreas Brandt (HU Berlin); Siemens AG (München)

Die Integration von Mobilteilnehmern in Telekommunikationsnetzen erfordert die Erweiterung der entsprechenden Planungstools, da zur Absicherung der QoS eine fundierte Dimensionierung der Links für die Mobilfunkzellen notwendig ist. Unter Berücksichtigung des dynamischen Verhaltens der Mobilteilnehmer wurden effiziente Algorithmen zur Performanceanalyse der Links für die Mobilfunkzellen hergeleitet und implementiert. Zwecks Priorisierung von Handover-Calls werden außerdem entsprechende Algorithmen unter Einbeziehung von Trunk-Reservierung entwickelt. Die Untersuchung von Mobilfunkzellen im statistischen Gleichgewicht führte zu Relationen zwischen den Modell-Parametern der Mobilfunkzellen, die die Quantifizierung dieser Modell-Parameter erleichtern.

In Telekommunikationsnetzen werden über einen Link oft viele unterschiedliche Verkehrsströme geschickt. Bei der Performanceanalyse solcher Netze werden aus Komplexitätsgründen die Verkehrsströme vor einem Link ohne Trunk-Reservierung zu einem und vor einem Link mit Trunk-Reservierung zur Priorisierung des Primärverkehrs zu zwei Verkehrsströmen zusammengefaßt. Der vom Link akzeptierte Verkehr und der nicht akzeptierte Verkehr müssen anschließend wieder in die individuellen Verkehrsströme aufgespalten werden. Die in der Literatur vorgeschlagenen Aufspaltungs-

formeln für die Varianzen der individuellen Verkehrsströme basieren auf dem Konzept des nicht freigemachten Verkehrs und wurden bisher nur für Links ohne Trunk-Reservierung untersucht, vgl. [4, 5]. Zur Entwicklung eines Netzplanungstools für Netze mit Trunk-Reservierung, bei dem die Berechnung der Ende-zu-Ende Blockierungswahrscheinlichkeiten auf einer Anpassung der ersten beiden Momente der freigemachten Verkehre basiert, wird die Güte der bekannten Aufspaltungsformeln für die ersten beiden Momente der Abgangsströme eines Links studiert. Für die Aufspaltung der Varianzen wird die Entwicklung besserer Verfahren angestrebt.

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. Das Ziel dieses Projektes 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 ca. 550 wissenschaftliche Einrichtungen und andere Standorte miteinander und hatte im Jahr 2001 ein monatliches Datenvolumen von ungefähr 400 Terabyte zu bewältigen. Bei Aufbau, Erweiterung und Betrieb eines solchen Netzes stellen sich verschiedene Fragen, wie die bereits vorhandenen oder neu zu beschaffenden Ressourcen möglichst effizient genutzt werden können.

In diesem Projekt werden im wesentlichen zwei Gruppen solcher Fragestellungen betrachtet: das Clustering und die Kernnetzoptimierung [2].

Das Ziel beim Clustering ist die Auswahl geeigneter Kernnetzstandorte und die Anbindung der übrigen Anwenderstandorte an diese Kernnetzknöten, siehe auch Projekt *Standortplanung für Telekommunikationsnetze*. Diese Wahl ist von entscheidender Bedeutung für die weitere Planung, weil sie Auswirkungen auf fast alle nachfolgenden Planungsschritte hat.

Bei der Kernnetzoptimierung ist zu entscheiden, welche Topologie das Kernnetz haben soll, welche Kapazitäten auf welchen Kanten installiert werden, und auf welchen Wegen die Daten letztlich übertragen werden. Neben verschiedenen technischen Forderungen sind bei diesem Planungsproblem vor allem zwei Aspekte von zentraler Bedeutung: die gewünschte Ausfallsicherheit des Netzes und die Verwendung des OSPF-Routing-Protokolls. Ausfallsicherheit bedeutet, daß selbst bei Ausfall einer einzelnen Verbindung oder eines einzelnen Knotens alle übrigen Knoten immer noch mit einer festgelegten Mindestbandbreite kommunizieren können. Das OSPF-Routing-Protokoll (Open Shortest Path First) 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 durch den Planer ein fester 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.

In den vorangegangenen Jahren wurden diese Planungsproblem in erster Linie vor dem Hintergrund des Auf- und Ausbau eines Netzes untersucht: Die Auswahl geeigneter Kernnetzknotten, die Zuordnung der Anwenderstandorte zu diesen Kernnetzknotten sowie die Planung des Kernnetzes, jeweils mit dem Ziel der Gesamtkostenminimierung.

Für einen effizienten Betrieb und eventuelle Erweiterungen des Netzes sind ähnliche Fragestellungen interessant, häufig jedoch mit anderen Nebenbedingungen und Zielvorgaben. In der operativen Netzplanung sind nicht mehr minimale Netzkosten das primäre Ziel. Stattdessen steht nun die Optimierung verschiedener Qualitätskriterien wie zum Beispiel die Kanten- oder Knotenauslastung für gegebene Ressourcen im Vordergrund.

Die in den Vorjahren entworfenen schnittebenenbasierten Algorithmen zur Lösung des Kernnetzoptimierungsproblems konnten durch neue Schnittebenen und alternative Modellierungen bestimmter Teilaspekte weiterentwickelt und teilweise deutlich verbessert werden. Zur CeBit wurde das Programm mit einer prototypischen grafischen Benutzeroberfläche ausgestattet und als Teil eines Netzwerkoptimierungs-Toolkits erfolgreich präsentiert. In der zweiten Jahreshälfte wurden hauptsächlich verschiedene Dekompositionsansätze zur Lösung des Problems und die dabei auftretenden Teilprobleme mathematisch untersucht. Erste Rechentests lassen vermuten, daß mit einigen dieser Dekompositionsansätze eine weitere Reduzierung der Programmlaufzeiten möglich ist. Desweiteren wurde der DFN-Verein in Diskussionen und durch Rechnungen bei der Planung für die Einführung von Level-3-Kernnetzknotten im G-WiN sowie beim Übergang zur 2. Ausbaustufe des G-WiN-Kernnetzes unterstützt.

Standortplanung für Telekommunikationsnetze

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

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

Telekommunikationsnetze besitzen oft Baumstruktur. Es gibt Kommunikationsendknotten, die Ausgangs- und Endpunkt allen auftretenden Verkehrs sind. Diese müssen mit Konzentratoren verbunden werden, an denen der Verkehr mehrerer Endknotten 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 erhalten, müssen bei der Planung eine Vielzahl von Anforderungen berücksichtigt werden. Beispielsweise sind nicht alle Verbin-

dungen zwischen Knoten möglich oder nur mit bestimmten Kapazitäten. Vielfach sind Konzentratoren und Kernnetzknotten auch noch mit diversen Kapazitätseinschränkungen versehen.

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

Im Laufe des Jahres wurde im Rahmen der Kooperationsverträge mit der Telekom Austria über *Optimale Standort- und Vermittlungswegeplanung* und mit E-Plus über *Entwicklung von Optimierungsverfahren für die MSC-Standortplanung* prototypische Software bei den Kooperationspartner installiert. Darüber hinaus wurde im Rahmen des Projektes *Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes* bei der Planung für die Einführung von Level-3-Kernnetzknotten im DFN G-WiN mitgearbeitet (siehe Abbildung 2.35).

Last-Ausgleichung innerhalb von Signaling Transfer Points

Bearbeitet von: Arie Koster

Kooperationspartner: Atesio GmbH (Berlin); E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf)

Signalisierung ist ein wesentlicher Bestandteil beim Betrieb eines Telekommunikationsnetzes. Störungen im Signalisierungsnetz können weitgehende Folgen für das Gesamtnetz haben. Der Ausfall (eines Teiles) des Signalisierungsnetzes kann zum Ausfall fast aller Dienstleistungen für die Kunden führen. Dies verringert die Einnahmen und hat u. U. sogar die Verpflichtung zu Kompensationsleistungen zur Folge. Das Signalisierungsnetz sollte deshalb äußerst zuverlässig sein und auch durch den Ausfall einzelner Komponenten nur begrenzt beeinträchtigt werden.

Das Signalisierungsnetz wird häufig getrennt vom eigentlichen Transportnetz verwaltet. Neben vielen anderen Sicherheitsvorkehrungen zur Gewährleistung der Leistungsfähigkeit des Netzes in Ausfallsituationen muß insbesondere darauf geachtet werden, daß die zentralen Routingeinheiten, die sogenannten *Signaling Transfer Points* (STPs), zuverlässig sind. Die Robustheit eines STPs wird in erheblichem Maße durch die Verteilung der Verkehrslast auf die einzelnen Routingprozessoren des STPs bestimmt.

Ein STP ist unterteilt in mehrere Cluster von Routingprozessoren, Common Channel Distributors (CCDs) genannt (vgl. Abbildung 2.36). Die anliegenden *Links* müssen jeweils einem CCD zugeordnet werden. Die physikalische Verbindung läuft über sogenannte Schnittstellenkarten, die Common Channel Link Controller (CCLK) genannt werden (vgl. Abbildung 2.36). Die Last eines CCDs wird durch die Gesamtlast der angeschlossenen Verbindungen bestimmt. Ein *Linkset* ist eine Menge von Verbindungen, die alle dieselben Knoten des Signalisierungsnetzes verbinden. Zur Gewährleistung der Funktionalität jedes STPs beim Ausfall einzelner CCDs oder Cluster sind folgende Bedingungen bei der Zuordnung der Links zu den CCDs einzuhalten:

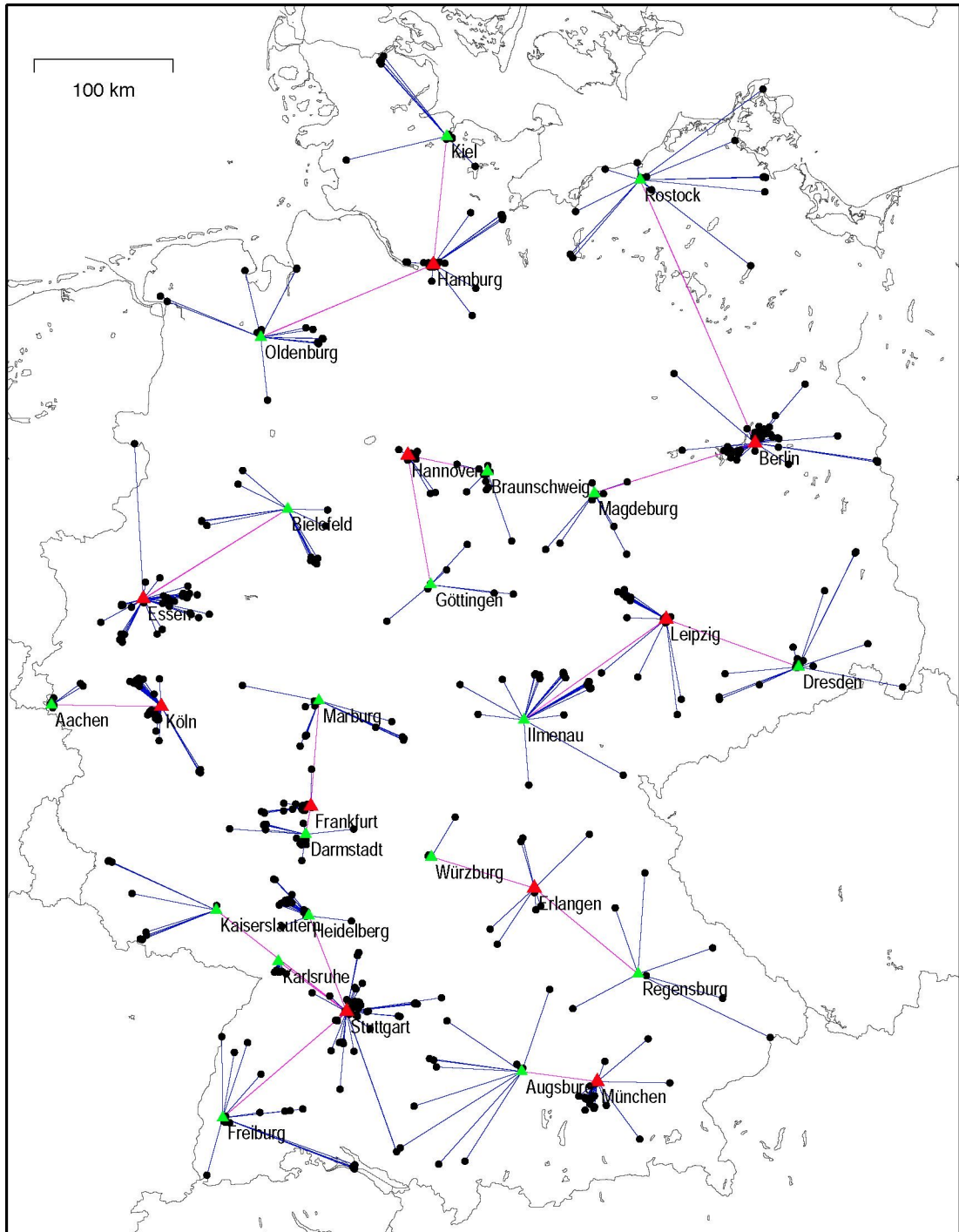


ABBILDUNG 2.35: Lösung des Clusteringproblems beim G-Win.

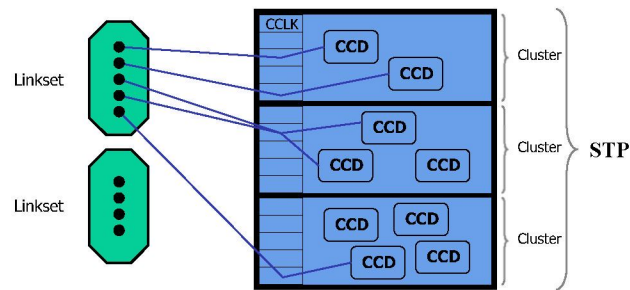


ABBILDUNG 2.36: Schematische Darstellung eines Signaling Transfer Points.

- Maximal die Hälfte eines Linksets darf an CCDs im gleichen Cluster angebunden werden.
- Die Verbindungen eines Linksets sollen möglichst gleich auf CCLKs von gerader bzw. ungerader Parität verteilt werden.
- Jede Anbindung eines Links an ein CCD ist über ein CCLK im gleichen Cluster vorzunehmen.

Die Verkehrslast auf einzelnen Verbindungen ändert sich ständig. Neben den täglichen Schwankungen gibt es längerfristige Lastverschiebungen, die eine regelmäßige Reoptimierung der Lastverteilung notwendig machen. Dabei ist zu beachten, daß die neue Konfiguration nicht zu stark von der bisherigen abweicht, da für jede Umschaltung die betroffene Verbindung für einige Zeit ausfällt.

Im Vorjahr wurde das Problem der Lastbalancierung bei Beschränkung der erlaubten Anzahl von Änderungen als ganzzahliges lineares Programm modelliert [12]. Eine Fallstudie für E-Plus zeigte, daß diese Aufgabe durch Einsatz moderner kommerzieller Optimierungssoftware verhältnismäßig gut gelöst werden kann. Zur Umsetzung dieser Resultate als Anwendung für E-Plus wurde eine entsprechende Lösung durch die Fa. Atesio GmbH realisiert.

Der praktische Einsatz dieses Programms hat jedoch gezeigt, daß die bislang nicht berücksichtigte Bedingung hinsichtlich des Anschlusses der Verbindungen an CCLKs unterschiedlicher Paritäten nicht immer innerhalb einer Nachbearbeitung gelöst werden kann. Im Berichtszeitraum wurde das o. g. Modell deshalb um entsprechende Bedingungen erweitert. Erste Experimente zeigen, daß auch das erweiterte ganzzahlige lineare Programm mit Standardsoftware den praktischen Anforderungen genügend gelöst werden kann.

Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze

Bearbeitet von: Arie Koster, Roland Wessäly, Adrian Zymolka

Kooperationspartner: Telekom Austria AG (Wien, Österreich); DFN-Verein zur

Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V. (Berlin); T-Systems Nova GmbH (Berlin)

Die Kommunikationsnetze der heutigen Informationsgesellschaft haben ein beständig wachsendes Verkehrsaufkommen zu bewältigen. Gleichzeitig stellen neue Dienste und Anwendungen zunehmend hohe Anforderungen an die Sicherheit und Flexibilität der Verbindungen, die sich nur durch Bereitstellung zusätzlicher Ressourcen erfüllen lassen. Um Kapazitätsengpässen vorzubeugen und den steigenden Ansprüchen langfristig gewachsen zu sein, müssen Netzbetreiber insbesondere im Kernnetz die verfügbaren Kapazitäten schnell und variabel ausbauen können. Die optische Technologie bietet hierfür das größte Potential.

Optische Netze gibt es in verschiedenen Ausprägungen, die sich anhand der eingesetzten Komponenten unterscheiden. Den Grundbaustein optischer Netze stellen Glasfasern dar, auf denen digitale Signale in Form kurzer Lichtpulse übertragen werden. Im Vergleich zu elektronischen Signalen lassen sich dadurch wesentlich höhere Übertragungsraten erzielen. Zudem erlaubt das optische Medium das sogenannte *Wavelength Division Multiplexing* (WDM), bei dem auf einer Glasfaser durch Verwendung verschiedener Wellenlängen mehrere Kanäle parallel genutzt werden können. Dadurch wird eine Vervielfachung der bestehenden Kapazitäten erreicht und zugleich die Flexibilität der Telekommunikationsnetze gesteigert, da künftige Kapazitätsänderungen lediglich durch den Austausch von Endgeräten möglich sind. Werden in den Knoten elektronische Schaltkomponenten verwendet, so bezeichnet man ein solches Netz als Punkt-zu-Punkt-WDM-Netz. Seit kurzer Zeit sind zudem sogenannte *Optical Cross-Connects* (OXC) verfügbar. Dabei handelt es sich um optische Schaltkomponenten, bei denen das durchlaufende Signal zur Weitervermittlung nicht mehr wie bisher in elektronische Form umgewandelt werden muß. Durch die Integration dieser Schalteinheiten innerhalb der Netze entstehen durchgängige optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden und schließlich die sogenannten rein optischen Netze kennzeichnen.

Bei der Planung optischer Netze besteht die Aufgabe darin, zu gegebenen Bedarfen eine Konfiguration der Netzkomponenten sowie der Lichtwege zu bestimmen, mit der die Gesamtkosten des Netzes minimiert werden. Um auch in Störsituationen noch einen festgelegten Netzdurchsatz gewährleisten zu können, sind ferner Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen. In Kooperation mit unseren Projektpartnern werden dafür einerseits effiziente mathematische Verfahren entwickelt, mit denen sich eine geeignete statische Konfiguration der Lichtwege berechnen läßt. Andererseits sollen durch den Vergleich verschiedener Szenarien auch mögliche Auswirkungen unterschiedlicher technologischer Entwicklungen auf die Planung und das Management optischer Netze erkundet werden. In einem weiteren Projekt innerhalb der Abteilung Optimierung wird parallel dazu das dynamische Netzverhalten bei sich zeitlich ändernden Bedarfen untersucht (siehe Projekt *Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze*).

Im Berichtszeitraum wurde aufbauend auf der zuvor hergeleiteten Modellierung der Problemstellung ein Lösungsverfahren erarbeitet. Bedingt durch die hohe Komplexität des Gesamtproblems verfolgen wir dabei einen Dekompositionsansatz, bei dem zwei aufeinanderfolgende Teilprobleme betrachtet werden. Das erste Teilproblem beinhaltet das Routing der Lichtwege und damit einhergehend die Dimensionierung der erforderlichen Kapazitäten. Verglichen mit der bisherigen Netzplanung resultieren aus den spezifischen Eigenschaften der optischen Technologie dabei zusätzliche Anforderungen. Zum einen unterliegt das optische Signal störenden Einflüssen, die die Länge von Lichtwegen beschränken und in regelmäßigen Abständen eine vollständige Regeneration durch sogenannte Transponder erfordern. Zum anderen können Lichtwege nicht aufgespalten werden, so daß beim Routing die Ganzzahligkeit des Flusses gewährleistet werden muß. Beide Aspekte stellen ergänzende Fragestellungen dar, die zunächst isoliert untersucht worden sind. 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. Innerhalb von Lichtwegen ist ein Wellenlängenwechsel mittels Konvertern möglich, deren Anzahl aufgrund hoher Kosten jedoch zu minimieren ist. Im Rahmen der Netzplanung ist diese neuartige Aufgabenstellung für optische Netze typisch. Sie führt auf ein Pfadfärbungsproblem in Graphen, für das neben der Verbesserung zuvor erarbeiteter Heuristiken insbesondere die Entwicklung eines exakten Verfahrens vorangetrieben wurde.

Das hergeleitete Lösungsverfahren wurde im Berichtszeitraum auch in Form eines Software-Tools zur Planung optischer Netze umgesetzt. Aufgrund der modularen, komponentenbasierten Netzabbildung lassen sich damit sowohl für Punkt-zu-Punkt-WDM-Netze als auch für rein optische Netze geeignete Konfigurationen ermitteln. In Zusammenarbeit mit unseren Kooperationspartnern wurden auch zahlreiche Details aus der Praxis berücksichtigt. Die resultierende Software ist in einer ersten Version auf der CeBIT 2001 präsentiert worden und kommt nach erfolgreichem Projektabschluß in einer weiterentwickelten Fassung bei der Telekom Austria AG in der Praxis zum Einsatz.

Frequenzzuweisung im Mobilfunk

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Martin Grötschel, Arie Koster

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf)

Den Betreibern von GSM-Netzen steht jeweils ein kleiner Teil des elektromagnetischen Frequenzspektrums zur Verfügung, um den Funkverkehr mit Mobiltelefonen abzuwickeln. Hierbei kommt u. a. Frequenzmultiplexing zum Einsatz, durch das das verfügbare Spektrum in Kanäle eingeteilt wird. Für die Kommunikation mit den Mobiltelefonen werden stationäre Sende-Empfang-Einheiten, sogenannte Transceiver, genutzt. Jedem Transceiver ist ein Kanal zugeordnet, und die Mobiltelefone nutzen jeweils den Kanal des Transceivers, über den sie momentan mit dem Funknetz logisch verbunden sind. Die gegenseitige Störung nahegelegener Transceiver, die dicht beiein-

ander liegende Kanäle verwenden, stellt ein zentrales Problem dar.

Bei der Erstellung eines *Frequenzplanes* legt der Netzbetreiber für jeden Transceiver fest, welcher Kanal genutzt wird. Da die Anzahl der Transceiver die der verfügbaren Kanäle oft um den Faktor 30 und mehr übersteigt, müssen Kanäle mehrfach verwendet werden. Unter Berücksichtigung zahlreicher technischer und rechtlicher Nebenbedingungen wird dabei das Ziel verfolgt, möglichst wenig störende Interferenzen zu verursachen. Eine Schätzung der ggf. auftretenden Interferenz erhält der Planer durch Signalprädiktionsrechnungen, in seltenen Fällen auch durch Meßfahrten.

Dieses Projekt endete nach fast sechsjähriger Laufzeit. Anfänglich wurde in erster Linie an der Entwicklung von Verfahren zur automatischen Erstellung von Frequenzplänen gearbeitet. Der Entwurf und die Implementierung von schnellen *primalen Heuristiken* zur Berechnung interferenzarmer Zuweisungen standen hierbei im Mittelpunkt. Im Vergleich zu bisher genutzten Verfahren konnten deutliche Verbesserungen erzielt werden [3]. Ein Teil der Verfahren ist seit Jahren im bewährten Einsatz bei E-Plus [10]. Außerdem hat die Fa. Cosiro die Software von E-Plus lizenziert und in ihr Funknetzplanungswerkzeug FUN integriert.

In 2001 lag der Schwerpunkt der Projektarbeit wie im Vorjahr auf Methoden zur Abschätzung der unvermeidbaren Interferenz. Ein zusammen mit Christoph Helmberg (ZIB) entwickeltes Verfahren basiert auf der Lösung einer semidefiniten Relaxierung eines k -Partitionierungsproblems. Auf dieser Grundlage konnten die bisher mit Abstand besten unteren Schranken für unvermeidbare Gleichkanalinterferenz berechnet werden. Insgesamt ließ sich nachweisen, daß die besten heuristisch generierten Frequenzzuweisungen etwa doppelt soviel Interferenz verursachen wie nachweislich unvermeidbar ist. Die resultierenden Gütegarantien sind zwar für die Praxis nicht zufriedenstellend, doch es konnte belegt werden, daß dies nicht allein den unteren Schranken anzulasten ist. Mit großem Rechenaufwand lassen sich die heuristischen Lösungen oft verbessern. Bisher zeichnet sich allerdings kein Weg ab, auf dem sich systematisch und mit vertretbarem Rechenaufwand ähnliche Verbesserungen erzielen lassen, vgl. [7].

Der Internet-Server [9] wird nun im zweiten Jahr betrieben. Neben der Beschreibung mehrerer Varianten von Frequenzzuweisungsproblemen, vgl. [8], stehen auch praxisnahe Testdatensätze zu Forschungszwecken zur Verfügung. Viele der Datensätze wurden im Rahmen des von der EU geförderten COST-259-Projektes zusammengestellt [6]. Diese sind auf dem Server erstmals öffentlich verfügbar. Neu hinzugekommen ist eine umfangreiche Übersicht über den Stand der Forschung [1].

MOMENTUM

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Thorsten Koch, Hinnerk Stüben, Arie Koster, Tobias Pfender

Kooperationspartner: Atesio GmbH (Berlin); E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf); KPN Reseach (Leidschendam, Niederlande); QQQ (Delft, Niederlande); Siemens AG (Berlin); Technische Universität Darmstadt; Technische Universität

Lissabon (Portugal); Telecel Vodafone (Lissabon, Portugal); Universität Bremen

Förderung: EU Projekt MOMENTUM, IST-2000-28088

Mit der Einführung von Mobilfunknetzen nach dem neuen UMTS-Standard sind völlig neue planerische Herausforderungen verbunden [11]. Ließ sich zum Beispiel bei GSM die Netzabdeckung noch weitgehend unabhängig von der Netzkapazität planen, so sind diese beiden Aspekte bei UMTS untrennbar verwoben. Ähnliche Effekte, wenn auch in weit schwächerem Maße, sind schon bei Netzen nach dem amerikanischen *cdma-One* Mobiltelefonie-Standard zu beobachten. Durch das bereits anfänglich breite Spektrum an Übertragungskapazität, das von wenigen kb/s bis hin zu 384 kb/s reichen soll, lassen sich jedoch auch die Erfahrungen aus der Planung von *cdma-One*-Netzen nur als grobe Anhaltspunkte verwenden. Zwar stehen den Planern für den bereits begonnenen bzw. unmittelbar bevorstehenden Aufbau von UMTS-Netzen in den Ballungszentren Deutschlands einige Simulationswerkzeuge zur Verfügung. Die Güte der einzelnen Werkzeuge muß sich jedoch im praktischen Einsatz erst noch beweisen. Methoden oder Programme zur systematischen Planung und Optimierung der Konfiguration von UMTS-Basisstationen unter weitgehender Berücksichtigung ihres komplexen Zusammenspiels sind derzeit noch am Anfang ihrer Entwicklung, siehe etwa [13].

Das europäische Projekt MOMENTUM, ein Akronym für *Models and Simulations for Network Planning and Control of UMTS*, setzt genau an diesem Punkt an [14]. Es werden Techniken und Algorithmen für die Planung und Optimierung der UMTS-Funkschnittstellenkonfiguration entwickelt, die künftig Eingang in die Planungs- und Optimierungsprogramme der Netzbetreiber finden sollen. Entsprechend dieser Zielsetzung sind neben mathematischen und nachrichtentechnischen Forschungsgruppen auch ein Systemtechniklieferant und drei Netzbetreiber an dem Projekt beteiligt. Folgende Ziele werden verfolgt:

1. Charakterisierung (neuer) Dienste hinsichtlich ihrer Anforderungen an die Übertragungstechnik;
2. Erstellung von Mobilitätsmodellen, Benutzungsprofilen und Planungsszenarien;
3. Erweiterung statischer Simulationstechniken auf Systemebene, so daß das dynamische Verhalten der Funkschnittstelle über kurze Zeiträume hinweg abgebildet werden kann;
4. Entwicklung eines dynamischen Simulators der UMTS-Funkschnittstelle auf Systemebene;
5. Erstellung rechnergestützter Studien zu statischen Kopplungen und über dynamische Effekte an der Funkschnittstelle, die bei der Planung zu berücksichtigen sind;
6. Entwicklung von flexiblen Planungs- und Optimierungsmethoden für die automatische Konfigurierung von UMTS-Basisstationen hinsichtlich der Auswahl der Standorte, der Sektoranzahl, der Sektorausrichtung, der Antennentypen und

deren Installationsparameter unter Berücksichtigung der gegenseitigen funktchnischen Beeinflußung „benachbarter“ Basisstationen;

7. Zusammenstellung einer Bibliothek von komplexen UMTS-Planungsszenarien mit öffentlichem Zugang.

In enger Zusammenarbeit mit den technischen Know-How-Trägern werden am ZIB insbesondere die Planungs- und Optimierungsmethoden entwickelt sowie Erfahrungen in der Parallelisierung von Simulations-Software eingebracht.

Publikationen

- [1] K. I. Aardal, C. P. M. van Hoesel, A. M. C. A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and solution techniques for the frequency assignment problem*, Report 01–40, ZIB, 2001.
- [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 Moments of the Overflow and Freed Carried Traffic for the GI/M/C/0 System*, Report 01-09, ZIB, 2001.
- [5] ———, *Individual Overflow and Freed Carried Traffics for a Link with Trunk Reservation*, Report 01-35, ZIB, 2001.
- [6] L. M. Correia, Hrsg. *Wireless Flexible Personalized Communications - COST 259: European Co-operation in Mobile Radio Research*, COST Action 259—Final Report, John Wiley & Sons, 2001.
- [7] A. Eisenblätter, *Frequency assignment in GSM networks: Models, heuristics, and lower bounds*, Dissertation, TU Berlin, Fakultät 2, 2001.
- [8] A. Eisenblätter, M. Grötschel, A. Koster, *Frequency Planning and Ramifications of Coloring*, Report 00–47, ZIB, 2000.
- [9] A. Eisenblätter, A. Koster, *FAP web*, 2000, <http://fap.zib.de>.
- [10] A. Eisenblätter, Th. Kürner, 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, 87–92.
- [11] H. Holma und A. Toskala (Hrsg.), *WCDMA for UMTS*, John Wiley & Sons, 2001.

- [12] A. M. C. A. Koster, *Re-Optimization of Signaling Transfer Points*, Report 00–18, ZIB, 2000.
- [13] T. Novosad, J. Laiho und A. Wacker (Hrsg.), *Radio Network Planning and Optimization for UMTS*, John Wiley & Sons, 2001.
- [14] MOMENTUM Consortium, *Models and simulations for network planning and control of UMTS*, IST-2000-28088 MOMENTUM, 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. Man modelliert hierbei die Eingabe als eine (endliche) *Anfragefolge* $\sigma = r_1, r_2, \dots$. Nach dem Bekanntwerden der Anfrage r_i muß ein Online-Algorithmus eine Entscheidung über seine weitere Arbeitsweise treffen, ohne die Anfragen r_{i+1}, r_{i+2}, \dots zu kennen. Je nach dem spezifischen Online-Modell sind die Entscheidungen des Online-Algorithmus zusätzlichen Einschränkungen unterworfen. Bei einem Online-Problem mit *Echtzeit-Anforderungen* muß ein Algorithmus innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern. Die Entwicklung geeigneter Gütekriterien und Algorithmen ist ein aktuelles Forschungsthema in der Online-Optimierung.

Online-Algorithmen spielen eine wichtige Rolle bei der effizienten Steuerung der innerbetrieblichen Logistik. Die Automatisierung von innerbetrieblicher Logistik erfordert – über die physikalische Steuerung von Geräten hinaus – auch eine effiziente Organisation der Transporte. 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. Lange Rechenzeiten verringern den Durchsatz im System, so daß verwendete Online-Algorithmen insbesondere auch Echtzeit-Anforderungen genügen müssen.

Online-Transportaufgaben mit Echtzeit-Anforderungen stellen sich weiterhin bei der Planung von Einsatzfahrzeugen, etwa bei der Zuordnung von Pannenhelfern zu liegengebliebenen Kraftfahrzeugen. Da künftige Pannorte im allgemeinen unbekannt sind, muß eine Planung auf Basis bekannter Daten strategisch gute Entscheidungen liefern, die Engpässe in der Zukunft vermeiden.

In der Telekommunikation ergeben sich Online-Fragestellungen beim Routing von neuen Verbindungsanfragen und bei der Rekonfiguration des Netzes nach Ausfallsituationen. Für die Berechnung einer neuen Netzkonfiguration steht nur eine kurze Zeitspanne zur Verfügung. Die vertiefte Behandlung von Themen aus diesem Schwerpunkt wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “Mathematics for key technologies” erfolgen (Teilprojekte C3 und C6).

Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen

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

Kooperationspartner: FIEGE eCom, bei der Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“; Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich in den letzten Jahren die von Sleator und Tarjan [14] 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.

Eine Unzulänglichkeit der kompetitiven Analyse besteht darin, daß der zugrundeliegende theoretisch schlimmste Fall in der Praxis häufig nur sehr unwahrscheinlich oder sogar ausgeschlossen ist. Die kompetitive Analyse ist zudem sehr pessimistisch. Oft ist ein optimaler Offline-Algorithmus durch seine vollständige Information derart bevorteilt, daß nur nahezu triviale Kompetitivitätsaussagen beweisbar sind (vgl. *triviality barrier* in [5]). Durch Einschränkungen für die möglichen Eingaben oder zusätzliche Restriktionen für die Arbeitsweise des Offline-Algorithmus kann man versuchen, die kompetitive Analyse weniger pessimistisch zu machen [3]. Allerdings helfen auch diese Modifikationen nicht immer, um eine gute Entscheidungshilfe bei der Auswahl eines für die Praxis geeigneten Algorithmus zu erhalten.

Ziel des Projekts ist es, praxistaugliche mathematische Modelle für Online-Aufgaben mit Echtzeit-Anforderungen 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 das OLDARP zurückgeführt werden (siehe z. B. [2, 12]).

Für die Minimierung der gewichteten Summe der Fertigstellungszeiten konnten wir im vergangenen Jahr bekannte Kompetitivitätsresultate verbessern. Es wurden ein deterministischer Algorithmus mit Kompetitivität $(1 + \sqrt{2})^2 < 5.83$ und ein randomisierter Algorithmus mit Kompetitivität $\frac{4}{\ln 3} < 3.65$ gefunden [10]. Die bisher besten oberen Schranken waren 8 (deterministisch) und 5.78 (randomisiert). Gleichzeitig konnten wir mit Hilfe spieltheoretischer Methoden untere Schranken für die Kompetitivität von randomisierten Algorithmen beweisen.

Für die Minimierung der maximalen oder durchschnittlichen Flußzeit existieren für das OLDARP nachweislich keine kompetitiven Algorithmen – weder deterministisch noch randomisiert [12, 8]. Mit dem Ansatz der *vertretbaren Belastung* war es uns gelungen, mit Hilfe einer sinnvollen Einschränkung der zulässigen Eingabefolgen Gütegarantien für die maximale und durchschnittliche Flußzeit für einen Online-Algorithmus zu beweisen [8]. Bei der angesprochenen Analysetechnik wird der Vergleich der Güte des Online-Algorithmus nicht mit dem Ergebnis irgendeines anderen Algorithmus durchgeführt, sondern mit einem Parameter, der die Systemlast beschreibt. Man kann somit Gütegarantien in Abhängigkeit der Systemlast angeben. Aufbauend auf dem Ansatz der vertretbaren Belastung konnten wir weitere Algorithmen mit Gütegarantien unter vertretbarer Belastung konstruieren [6, 9].

Beim *Online Bin Coloring Problem* (OLBCP) müssen farbige Gegenstände dergestalt in Behälter verpackt werden, daß die maximale Anzahl von Farben in einem Behälter minimiert wird. Dieses Problem tritt (in komplexerer Form) im Bereich der innerbetrieblichen Logistik auf [11]. Zu Beginn unserer Analyse des OLBCP untersuchten wir es mit Hilfe der kompetitiven Analyse. Dabei ergaben sich überraschende Ergebnisse. Eine sinnvolle „Greedy-Strategie“ erreicht eine strikt schlechtere Kompetitivität als ein trivialer Algorithmus. Dessen Kompetitivität ist im wesentlichen die bestmögliche. Selbst durch Randomisieren kann man keine bessere Güte (vom Blickpunkt der kompetitiven Analyse aus) erreichen. Um hier Entscheidungshilfen für die Auswahl geeigneter mathematischer Algorithmen zu gewinnen, werden wir in nächsten Schritten die Anwendbarkeit alternativer Gütekriterien, insbesondere vertretbarer Belastungen und *Average-Case-Analyse*, untersuchen.

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-Systems Nova GmbH (Berlin)

Bei der dynamischen Konfiguration optischer Kommunikationsnetzwerke wird das optische Netzwerk als Graph G zusammen mit einer Menge W von Wellenlängen modelliert. Eine Verbindung zwischen zwei Knoten des Netzwerkes besteht aus einem oder mehreren *Lichtwegen*, wobei ein Lichtweg ein Weg P in G zusammen mit einer Wellenlänge $\lambda \in W$ ist. Damit wird abgebildet, daß Signale an den Knoten optisch verschaltet werden und daher die anfangs gewählte Wellenlänge auf ihrem gesamten Weg zum Zielknoten beibehalten. Da pro Kante jede Wellenlänge nur einmal zur Verfügung steht, fordert die *Wellenlängenkonfliktbedingung*, daß zwei gleichzeitig geroutete Lichtwege, die dieselbe Kante benutzen, verschiedene Wellenlängen besitzen müssen. Ein *Call* ist eine Anfrage über eine Zahl von Verbindungen (Lichtwegen) zwischen zwei Knoten des Netzwerkes. Das Problem der dynamischen Konfiguration besteht darin, daß im Zeitverlauf Verbindungsanfragen gewisser Dauern auftreten, für die zum einen zu entscheiden ist, ob sie geroutet oder abgelehnt werden sollen (*Online Call Admission*). Zum anderen muß im passenden Zeitraum die erforderliche Men-

ge an Lichtwegen für einen angenommenen Call bereitgestellt werden (*Routing and Wavelength Allocation*). Zusätzlich können Kanten oder Knoten des Netzwerkes ausfallen, so daß für die betroffenen Verbindungen ein anderes Routing gefunden werden muß.

Das Hauptziel unseres Projektes ist es, Algorithmen für *Call Admission* und *Routing and Wavelength Allocation* zu entwickeln und zu analysieren. Dazu ist es unter anderem erforderlich, *worst-case*-Szenarien zu betrachten, also Anfragesequenzen und Ausfallsituationen, für die ein Algorithmus denkbar schlechte Entscheidungen fällt. Nachdem wir im Vorjahr die Modellierung als Problem der Online-Optimierung abgeschlossen und mit dem Entwurf erster Algorithmen unter stark vereinfachenden Annahmen begonnen hatten, lag der Fokus im Berichtszeitraum auf der Weiterentwicklung und Analyse von Algorithmen sowie der Entwicklung eines Simulationstools, das uns darin unterstützt, *worst-case*-Szenarien zu entwickeln und Algorithmen praxisnah zu beurteilen. Es ist uns gelungen, einen für einen Spezialfall des Problems bekannten Algorithmus zu verallgemeinern und mit Hilfe der kompetitiven Analyse theoretisch zu evaluieren. Dabei wurde eine neue Beziehung zwischen Last und Färbung gefunden. Von praktischer Seite her konnten wir erste experimentelle Resultate durch den Vergleich der bekannten Algorithmen vom *Greedy*-Typ mit einem von uns entwickelten Algorithmus erzielen, der die Kombinatorik der Wellenlängen berücksichtigt.

Im weiteren Projektverlauf werden wir die Algorithmen insbesondere im Hinblick auf Anfragedauern und Ausfallsituationen weiterentwickeln und ausführliche Vergleichsstudien anhand des Simulationstools erstellen. Weiterhin werden wir an der theoretischen Analyse dieser Algorithmen arbeiten, die auch Aufschluß über die Struktur derjenigen Anfragesequenzen geben wird, auf denen ein Algorithmus schlechte Eigenschaften zeigt.

Echtzeitsteuerung von Aufzugssystemen

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

Kooperationspartner: FIEGE eCom, ehem. Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm

„Echtzeitoptimierung großer Systeme“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

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 Aufzugssystemen 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 haben wir neue Reoptimierungsstrategien zum Einsatz von Offline-Algorithmen in Simulationen untersucht. Der parameterbehaftete Δ -REPLAN-Ansatz schlägt eine Brücke zwischen den beiden extremen Online-Strategien REPLAN (Reoptimieren nach jedem Ereignis) und IGNORE (Reoptimieren nach Planfertigstellung) durch Einführen von geeigneten Nebenbedingungen in das Offline-Problem. Durch Justieren des Parameters kann der Benutzer ein Verhalten zwischen dem von REPLAN und IGNORE erreichen (Abbildung 2.37).

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.

Integrierte Echtzeit-Optimierung heterogener Transportsysteme

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

Kooperationspartner: FIEGE eCom, ehem. bei der Herlitz PBS AG (Berlin)

Förderung: Schwerpunktprogramm „Echtzeitoptimierung großer Systeme“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

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 Integrations-effekte 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 FIEGE eCom, ehem. bei der Herlitz PBS AG, Berlin, stellt uns in diesem Zusammenhang Daten seines vollautomatischen Palettenfördersystems in Falkensee bei Berlin zur Verfügung.

Die im Projekt früher entwickelte integrierte Offline-Steuerung mit einem Branch-and-

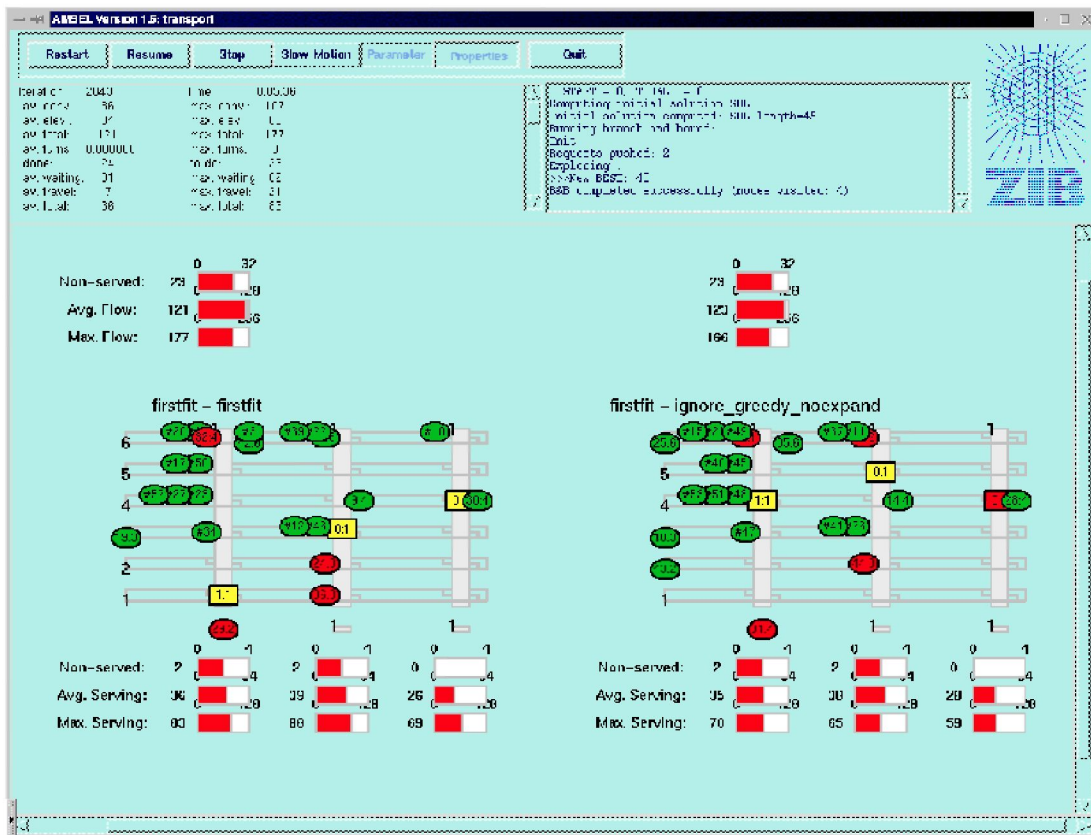


ABBILDUNG 2.37: Bildschirmdarstellung des Simulationsprogramms für Aufzugssysteme.

Cut-Verfahren ist für relevante Problemgrößen leider nicht echtzeitfähig. Daher sind wir zunächst zu dekomponierten Algorithmen (Zuordnung und Reihenfolgeplanung getrennt) zurückgekehrt. Für diese haben wir die Abhängigkeit der Leistungsfähigkeit von Systemparametern in Simulationen untersucht. Hierbei konnten sich recht unterschiedliche Verfahren als geeignet für jeweils eine bestimmte Systemumgebung herausstellen. Die mathematische Charakterisierung solcher „Erfolgsradien“ von Algorithmen im Parameterraum steht noch aus.

Um evt. doch noch ein echtzeitfähiges integriertes Optimierungsverfahren zu erhalten, werden wir einen neuen Ansatz auf Basis von Spaltengenerierung (vgl. Projekt *Online-Disposition von Fahrzeugen*) verfolgen.

Die Ergebnisse des Gesamtprojekts sind für das Buch [7] aufbereitet worden.

Online-Disposition von Fahrzeugen

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

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

Der ADAC verfügt über eine heterogene Flotte von mehr als 1600 Pannenhilfsfahrzeugen, deren Lage jederzeit mit Hilfe von GPS genau lokalisiert werden kann. In fünf über Deutschland verteilten regionalen Hilfezentralen werden Pannemeldungen angenommen. Derzeit erfolgt die Disposition der Einsatzmittel (sowohl der ADAC-Flotte als auch externer Servicepartner) manuell. Das *PANDA*-Computer-System unterstützt dabei den Disponenten mit Information über Position und Status der aktuellen Aufträge und der ADAC-Service-Mobile. Ausgehend von dieser Information versucht der Disponent dann einen Einsatzplan aufzustellen, der eine gute Service-Qualität garantiert (d. h. Wartezeiten von 20 bis 60 Minuten, je nach Lastzustand) und gleichzeitig möglichst geringe Betriebskosten verursacht. Diese Aufgabe ist aus den folgenden Gründen schwierig:

- Eine gute Einsatzplanung erfordert normalerweise eine globale Berücksichtigung der Einsatzmittel und der Anfragen. Besonders in Situationen starker Belastung ist dies sogar für erfahrene Disponenten kaum möglich, da ihre Übersicht in der Regel auf lokale Alternativen begrenzt ist.
- Das Problem besitzt einen *Online-Charakter*: Entscheidungen müssen ohne Kenntnis der in (vielleicht unmittelbarer) Zukunft liegenden neuen Pannemeldungen getroffen werden. Erweist sich eine Entscheidung später als ungünstig, so kann sie nur in begrenztem Maße revidiert werden.
- Die Lösung erfolgt in einer *Echzeit*-Arbeitsumgebung. Beim Auftreten neuer Anfragen muß der Disponent innerhalb kurzer Zeit diese in die Einsatzplanung einbauen.

Ziel dieses Projektes ist es, ein Online-Dispatching-Verfahren zu entwickeln, das für die Berechnung einer *Echzeit*-Einsatzplanung mit globaler guter Service-Qualität und niedrigen Gesamtbetriebskosten verwendet werden kann. Die Umsetzung auf das konkrete System des ADAC wird dabei vom *Intergraph Public Safety* (IPS), dem Software-Lieferanten des ADAC, übernommen.

Als Unterproblem tritt hierbei das *Offline*-Vehicle-Dispatching auf, das darin besteht, innerhalb garantierter Antwortzeit (etwa 5 Sek. für die Computerberechnung) allen zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannten Aufträgen Einsatzmittel dergestalt zuzuordnen, daß alle Restriktionen eingehalten werden und die Gesamtkosten minimal sind.

Wir haben uns zunächst diesem Problem gewidmet und es als ein Vehicle-Routing-Problem-With-Soft-Time-Windows modelliert. Unser Algorithmus benutzt einen Spaltengenerierungsansatz für die Lösung des bei der Modellierung entstehenden Mengenpartitionierungsproblems. Bei den vom ADAC gelieferten Testinstanzen mit realen Daten erzielte unser Algorithmus gute Ergebnisse. Er berechnete in deutlich

kürzerer Zeit bessere Einsatzplanungen als ein für Vergleichszwecke von IPS zur Verfügung gestellter kommerzieller Code, der auf genetischen Algorithmen basiert [13]. Darüber hinaus erfüllt der Algorithmus drei erwünschte Eigenschaften für den Einsatz in einer *Echtzeit*-Umgebung:

- Sogar in Szenarien mit künstlich stark erhöhter Belastung ist er in der Lage, sehr früh (d. h. in weniger als 5 Sekunden) eine qualitativ hochwertige Lösung zu liefern, die dann, wenn die Bedingungen eine längere Rechenzeit erlauben, in weiteren Iterationen verbessert wird.
- Das Leistungsverhalten bei Zunahme der Last sinkt langsamer als bei dem alternativen Verfahren.
- Der Algorithmus kann eine Gütegarantie in der Form einer unteren Schranke für die Kostenfunktion liefern. Dieser Vorteil stammt aus der Nutzung exakter kombinatorischer Optimierungsverfahren. Im Gegensatz dazu sind solche unteren Schranken bei Primal-Heuristiken und Meta-Heuristiken (wie dem oben erwähnten genetischen Code) nicht vorhanden.

Nach der Lösung des Offline-Unterproblems muß nun die Suche nach geeigneten Online-Strategien im weiteren Projektverlauf unternommen werden. Hierbei werden wir die Erfahrungen und Ideen aus den Projekten *Modellierung und kompetitive Analyse von Transportproblemen* und *Integrierte Echtzeit-Optimierung heterogener Transportsysteme* nutzen.

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 Symposium on Theoretical Aspects of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1770, Springer, 2000, 639–650.
- [3] M. Blom, S. O. Krumke, W. E. de Paepe und L. Stougie, *The online-TSP against fair adversaries*, *Inform Journal on Computing* **13** (2001), Nr. 2, 138–148.
- [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, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [6] B. Glück, *Online-Steuerungen automatischer Transportsysteme bei vertretbarer Belastung*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2000.

- [7] M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau (Hrsg.), *Online optimization of large scale systems*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2001.
- [8] D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *The online dial-a-ride problem under reasonable load*, Proceedings of the 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1767, Springer, 2000, 125–136.
- [9] S. O. Krumke, *Online optimization: Competitive analysis and beyond*, Habilitationsschrift, Technische Universität Berlin, eingereicht September 2001.
- [10] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *News from the on-line traveling repairman*, Proceedings of the 26th International Symposium on Mathematical Foundations of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2136, 2001, 487–499.
- [11] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bin coloring*, Proceedings of the 9th Annual European Symposium on Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, 74–84.
- [12] S. O. Krumke und J. Rambau, *Online-Optimierung*, Report 00-55, ZIB, 2000.
- [13] S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Realtime-dispatching of guided and unguided automobile service units with soft time windows*, Report 01-22, ZIB, 2001.
- [14] 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

Im Verkehr gibt es durch die immer größere Verfügbarkeit und immer bessere Qualität von Daten (Stichworte GPS und E-Ticketing) und durch die zunehmende Liberalisierung des öffentlichen Verkehrs ein gutes Umfeld für den Einsatz von Optimierungsverfahren.

Das klassische Einsatzfeld ist der Bereich der operativen Planung, in dem mit zeitlichem Vorlauf und mit vollständiger Information der Betrieb für einen zukünftigen Zeitraum, etwa eine Fahrplanperiode, vorausgeplant wird. Die operative Planung bietet die größten Potentiale und wird auch weiterhin ein interessantes Feld bleiben. Wir haben dort mit verschiedenen Projekten wie der *Optimierung der Fahrzeugeinsatzplanung des Berliner Behindertenfahrdienstes Telebus*, der *Optimierung der Fahrzeugumlaufplanung im Nahverkehr* und der *Optimierung der Dienstplanung im Nahverkehr* eine Reihe von Systemen entwickelt und mit unseren Partner in den betrieblichen Einsatz gebracht. Unser aktuelles Projekt zur *Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben* dient der Anwendung und Weiterentwicklung unserer Methoden (aus den

öffentlich geförderten Nahverkehrsprojekten der letzten Jahre) für den besonders interessanten Fall eines sehr großen Betriebes. Ausserdem wollen wir damit als Berliner Institut einen Beitrag zur Verbesserung der wirtschaftlichen Situation des ÖPNVs in Berlin leisten.

In der Zukunft rücken daneben erweiterte Fragestellungen in den Blickpunkt. Ein Trend ist die Integration mehrerer aufeinanderfolgender Planungsschritte zur Nutzbarmachung weiterer Optimierungspotentiale und zur Verbesserung der Planungsqualität. In unserem Projekt zur *Integrierten Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* zielen wir vor allem auf den Regionalverkehr, denn aufgrund spezieller Gegebenheiten ist dort die klassische sequentielle Planung nicht die richtige Lösung. Ein weiterer Trend ist die Erweiterung der Planung auf stochastische Szenarien, die wir in unserem Projekt *Management verteilter Lager* untersuchen. Noch weiter greifen zwei beantragte Projekte zur *Strategischen Planung im Nahverkehr* und zur *Systemplanung im Bahnverkehr*, mit denen wir uns erstmals auf die Ebene des Entwurfs von Verkehrssystemen bzw. von Teilen von Verkehrssystemen begeben. Die vertiefte Behandlung von Themen aus diesem Schwerpunkt wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums "Mathematics for key technologies" erfolgen (Teilprojekt B1).

Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel

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

Förderung: Berliner Verkehrsbetriebe (BVG)

In diesem Projekt geht es um die Anpassung, Erweiterung und Nutzbarmachung von Optimierungsverfahren zur Dienstbildung für die Berliner Verkehrsbetriebe (BVG).

Das Projekt basiert auf unseren Arbeiten zur Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV innerhalb der BMBF-Förderprogramme „Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik“ und „Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft“. Dort wurden Optimierungssysteme zur Umlauf- und Dienstplanung entwickelt, die die BVG innerhalb ihres Planungssystems BERTA nutzen möchte. Für die Umlaufplanung wurde dieses Ziel in einem Vorgängerprojekt bereits erreicht. Nun arbeiten wir an der Ausdehnung dieser Möglichkeiten auf die Dienstplanung. Neben der großen betrieblichen und auch monetären Bedeutung der Dienstplanung an sich ist die Verfügbarkeit einer leistungsstarken Dienstplanoptimierung auch zur vollständigen Erschließung des bekannten Potentials aus der Umlaufplanung wichtig. Diese Potentiale konnten bisher nur zum Teil realisiert werden, da eine effiziente Fahrtenverknüpfung zu Fahrzeugumläufen zu schwierigen Dienstplanungsproblemen führt, die mit den traditionell verwendeten Methoden nicht mehr beherrschbar sind.

Die Anpassung unseres Dienstplanungsverfahrens an die Belange der BVG ist auch aus algorithmischer Sicht eine interessante Aufgabe. Die BVG ist der viertgrößte Ver-

kehrsbetrieb der Welt mit aus planerischer Sicht durchaus unterschiedlichen Bus-, Tram- und U-Bahn-Bereichen. Die BVG wendet eine besonders große Vielfalt an komplexen Dienstplanungsregeln an. Als einziger Verkehrsbetrieb in Deutschland führt die BVG einen durchgehenden 24h-Betrieb mit entsprechenden Fragen des Tagesübergangs durch. Wegen der vielen Betriebshöfe und Turnusse ist die Frage einer über die verschiedenen Unternehmenseinheiten ausgewogenen Planung von besonderer Bedeutung.

Wir haben unser Dienstplanungssystem DS-OPT im Berichtszeitraum an die konkreten Erfordernisse der BVG angepaßt. Dazu mußten wir das vollständige BVG-Regelwerk der Dienstplanung ermitteln und abbilden. Dies zog eine Reihe von Erweiterungen im Bereich der Diensterzeugung nach sich.

Die BVG hat die Eignung der Dienstplanung anhand von mehreren typischen Szenarien für die Betriebsbereiche Bus und Tram evaluiert und bestätigt. Im Bereich Tram wurde die Dienstplanoptimierung darüber hinaus zur Durchführung einiger Szenarioanalysen verwendet. In der Zukunft zielen wir auf eine stärkere Integration von Umlauf- und Dienstplanung und auf den Durchbruch zur Produktionsplanung.

Übersichten zur Optimierung im Verkehr mit Bezug auf die Dienstplanung finden sich in [1] und [7], siehe auch [2]. Modellierungsaspekte zur Dienstplanung sind beschrieben in [5]. Eine detaillierte Beschreibung der mathematischen Ergebnisse gibt [3]. Im Zusammenhang damit untersucht [6] die approximative duale Lösung von Set-Partitioning Problemen. Die Arbeit [9] diskutiert Aspekte der Anwendung von DS-OPT.

Integrierte Umlauf- und Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel, Steffen Weider

Kooperationspartner: IVU Traffic Technologies AG (Berlin); mentz datenverarbeitung gmbh (München); Regensburger Verkehrsbetriebe GmbH (Regensburg)

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Wichtige Teilschritte der operativen Planung von Verkehrsbetrieben sind die Fahr- oder Umlaufplanung und die Dienstplanung. Die meisten Verkehrsbetriebe planen diese Teilschritte sequentiell. Vor allem in Regionalverkehrsbetrieben treten jedoch bei diesem Vorgehen Probleme auf. So können fehlende Pausenzeiten oder Ablösemöglichkeiten in den Umlaufplänen zu ungültigen Diensten oder nicht verplanbaren Fahrten führen. Bisher werden diese Probleme umgangen, indem die Abstimmung von Umlauf- und Dienstplan über heuristische Hilfsregeln erfolgt. So werden z. B. die maximalen Längen von Fahrzeugumläufen beschränkt, damit Fahrer nicht außerhalb des Betriebshofes abgelöst werden müssen, oder nach jeder Rotation eines Fahrzeugs werden Pausenzeiten im Umlaufplan berücksichtigt, um ungültige Dienste zu vermeiden. Dies schränkt den Lösungsraum des Problems jedoch erheblich ein, so daß die Pläne ineffizient werden.

Unsere ersten Fallstudien zeigen, daß ein integrierter Planungsansatz nicht nur gültige

Umlauf- und Dienstpläne erzeugen kann, sondern auch in der Lage ist, erhebliche Einsparpotentiale zu realisieren, siehe Abbildung 2.38.

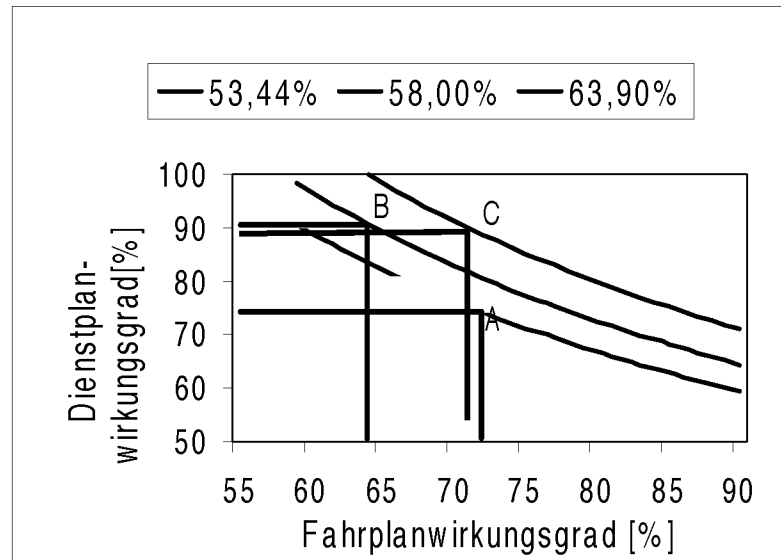


ABBILDUNG 2.38: Verschiedene Methoden der Planung von Umläufen und Diensten am Beispiel eines Betriebshofs eines Regionalverkehrsbetriebes aus dem Ruhrgebiet: Sequentielle Planung (A), sequentielle Planung mit heuristischer Berücksichtigung von Diensteigenschaften (B), integrierte Umlauf- und Dienstplanung (C). Der Datensatz umfasst ca. 1500 Fahrgastfahrten.

Unser Optimierungssystem für integrierte Umlauf- und Dienstplanung (IS-OPT) basiert auf einem ganzzahligen linearen Programm, welches die IP-Modelle für das Umlauf- und das Dienstplanungsproblem über die Leerfahrten koppelt.

Dieses IP-Modell wandeln wir mit Hilfe der Lagrangerelaxierung in ein Optimierungsproblem über der Summe zweier stückweise linearer, konvexer Funktionen um. Das Auswerten dieser Funktionen an einem bestimmten Punkt entspricht dabei dem Lösen eines Umlauf- bzw. Dienstplanungsproblems. Dazu verwenden wir Methoden, die auf den am ZIB entwickelten Verfahren zur Umlauf- und Dienstop Optimierung basieren. Auf dieses konvexe Optimierungsproblem wird ein proximales Bündelverfahren nach Kiwiel angewendet, welches uns eine geschätzte untere Schranke und eine angenäherte Lösung der LP-Relaxierung des ursprünglichen Modells liefert. Diese Informationen verwenden wir in verschiedenen Primalheuristiken, um kompatible Umlauf- und Dienstpläne zu erhalten.

Zum Testen des Prototypen von IS-OPT stehen uns Szenarien zur Verfügung, die auf Produktionsdaten verschiedener Verkehrsunternehmen basieren. Unser größtes Szenario

rio enthält 1.536 Fahrgastfahrten und (nach Preprocessing) über 70.000 Leerfahrten und ein Vielfaches an möglichen Fahrzeugwechselln.

Erste Berechnungen haben gezeigt, daß es möglich ist, eine integrierte Umlauf- und Dienstplanung durchzuführen und dabei alle Fahrgastfahrten zu verplanen. Die Anzahl der Fahrzeuge in einer Lösung entspricht dabei in allen untersuchten Fällen dem theoretischen Minimum, und die Kosten liegen in der Nähe der geschätzten unteren Schranke. Details zu den Rechenergebnissen können in [4] gefunden werden.

Management verteilter Lager

Bearbeitet von: Christoph Helmberg, Stefan Röhl

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

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 zwischen den Lagern, so daß alle Anfragen mit möglichst hoher Wahrscheinlichkeit zeitgerecht befriedigt werden können und die dabei anfallenden Fahrtkosten minimiert werden.

Konkret untersuchen wir in diesem Projekt, das seit Anfang 2001 vom BMBF innerhalb des Förderprogramms *Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung* unterstützt wird, das folgende Fallbeispiel. Unser Projektpartner, die Fiege eCom, betreibt 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, für die ca. 30000 Artikel größtenteils in produktreinen Paletten vorrätig gehalten werden. Die Aufgabe der Logistik ist es, die Auslagerungsanfragen an jedem Ort zeitgerecht zu bedienen. Die Planung der Transporte erfolgt zur Zeit von Hand, wobei die Verteilung der Artikel auf die Lager freigestellt ist und fünf Lastkraftwagen zur Verfügung stehen.

Im Berichtszeitraum wurde eine detaillierte Problembeschreibung erarbeitet und erste numerische Versuche mit einem deterministischen Ansatz unternommen. Als mathematisches Modell dienen dabei durch lineare Nebenbedingungen gekoppelte Netzwerkflußprobleme, die den zeitdiskretisierten Fluß der LKWs und Paletten widerspiegeln. Um trotz der Größe des entstehenden linearen Programms rasch zu guten Näherungslösungen zu kommen, wurde ein Dekompositionsansatz mittels Lagrange-Relaxierung in Kombination mit einem Bündelverfahren zur Bestimmung der Multiplikatoren gewählt. Das verwendete Bündelverfahren ist eine auf den Erfahrungen im Projekt *Semidefinite Optimierung* aufbauende Eigenentwicklung, die die Aggregation der Subgradienten gleichzeitig zur Erzeugung von primalen Näherungslösungen nutzt und den Einsatz primaler Schnittebenen gestattet (siehe [8]). Erste numeri-

sche Versuche mit realen Offline-Daten über einen Zeitraum von zwei Wochen deuten darauf hin, daß bereits die auf diesen Näherungslösungen basierenden Heuristiken zufriedenstellende Ergebnisse liefern. Ein genauer Vergleich unserer Lösungen mit den realisierten Transporten vor Ort ist zum gegenwärtigen Zeitpunkt wegen fehlender Transportdaten jedoch noch nicht möglich, wird aber im Zusammenhang mit der unmittelbar bevorstehenden Verfügbarmachung der Online-Daten des Lagerverwaltungssystems unseres Projektpartners realisierbar.

Neben einer weiteren Verbesserung des oben skizzierten Lösungsansatzes wird mit der Verfügbarkeit der Online-Daten nun an einem stochastischen Modell zur Verfeinerung der gegenwärtigen einfachen erwartungswertbasierten Vorratshaltung an den Lagerorten (MIN-MAX-Liste) und an einem stochastischen Programmierungsansatz für die Palettentransporte gearbeitet.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Optimization of transportation systems*, Report 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] ———, *Duty Scheduling in Public Transit*, Report 01-02, ZIB, 2001.
- [4] ———, *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Nahverkehr*, Report 02-10, ZIB, 2002.
- [5] 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.
- [6] C.-Y. Byun, *Lower bounds for large-scale set partitioning problems*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2001.
- [7] 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.
- [8] C. Helmberg, *A Cutting Plane Algorithm for Large Scale Semidefinite Relaxations*, Report 01-26, ZIB, 2001.
- [9] M. Kammler, *Optimierungsverfahren für Dienstpläne im ÖV*, Nahverkehrspraxis 7/8 (2000), 22.

2.2.13 Grid Computing

DataGrid

Bearbeitet von: Alexander Reinefeld, Thomas Röblitz, Florian Schintke, Thorsten Schütt

Kooperationspartner: CERN (CH), PPARC (UK), INFN (I), CNRS (F), NIKHEF (NL), ESA/ESRIN (I); Industriepartner: IBM (UK), Compagnie des Signaux (F), Datamat (I); Assoziierte Partner: Helsinki Institute of Physics and CSC (SF), Swedish Natural Science Research Council (SE), Instituto Trentino di Cultura (I), ZIB Berlin (D), KIP Heidelberg (D), CEA/DAPNIA (F), IFAE Barcelona, CNR (I), CESNET (CZ), KNMI (NL), SARA (NL), SZTAKI (HU)

Förderung: Europäische Union

Am europäischen DataGrid-Projekt (www.eu-datagrid.org) sind unter der Federführung des CERN mehr als 170 Wissenschaftler aus 21 Institutionen beteiligt. Ziel des Projektes ist es, für die im Jahre 2005 geplante nächste Generation von Kernteilchen-Experimenten auf dem Large Hadron Collider (LHC) die zur Datenauswertung erforderliche Rechnerinfrastruktur zu entwickeln und zur Verfügung zu stellen. Die prognostizierte Datenmenge von mehreren Petabyte (10^{15} Byte) Daten pro Jahr sind derart hoch, dass selbst die weltweit leistungsstärksten Supercomputer zur Auswertung der Daten nicht mehr ausreichen. Erstmals besteht hier die zwingende Notwendigkeit zum Einsatz von Techniken des Grid Computing.

Zur Lösung dieser internationalen Herausforderung ist geplant, mehrere tausend handelsübliche PCs zu Clustern zu verbinden und in sogenannten „Tier 1 Regionalzentren“ zur Auswertung der Daten zu betreiben. Regionalzentren sind derzeit für Italien, Frankreich, Deutschland, England, Skandinavien, die Niederlande und die USA geplant. Zusammen mit den Clustern der kleineren „Tier 2 Zentren“ werden ab dem Jahr 2005 weltweit insgesamt ca. 50.000 PCs zur Datenanalyse zur Verfügung stehen.

Unsere Hauptaufgabe liegt in der Integration der lokalen Clustersysteme in das Computational Grid. Im Berichtszeitraum haben wir zunächst ein Architekturkonzept zur Einbindung der Cluster in das Grid erarbeitet. Es sind APIs und Protokolle zum Austausch der Daten und Kontrollnachrichten entwickelt worden. Da wir nicht davon ausgehen, daß in jedem Regionalzentrum die gleiche Hard- und Systemsoftware vorhanden sein wird, ist die effiziente Einbindung verschiedener Ressourcen-Managementsysteme und Betriebssysteme von besonderer Bedeutung.

Der erste Meilenstein dieses Projektes wurde mit dem Aufbau eines noch sehr rudimentären internationalen Testbeds im September des Berichtjahres erreicht. Auf der Basis dieses Testbeds wird nun die Funktionalität sukzessiv erweitert.

UNICORE-PLUS - Uniformes Interface für Computer-Ressourcen

Bearbeitet von: Hinnerk Stüben, Alexander Reinefeld, George Din

Kooperationspartner: FZ Jülich (Koordinator); DWD Offenbach; LRZ München;

Pallas GmbH; PC² Paderborn; RUKA Karlsruhe; RUS Stuttgart, TU Dresden
Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

UNICORE-PLUS 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. In UNICORE werden moderne Zertifizierungstechniken für sichere Kommunikation und Authentifizierung eingesetzt.

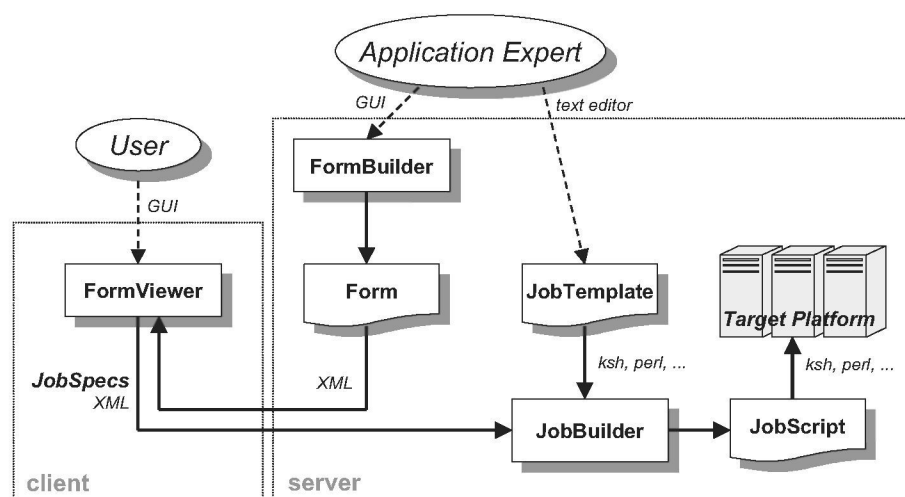


ABBILDUNG 2.39: *GuiGen*-Toolkit des ZIB zur Entwicklung applikationsspezifischer Eingabemasken (*Forms*.)

Um die Akzeptanz von UNICORE - und ganz allgemein von Grid Systemen - zu fördern, ist es wichtig, dem Endbenutzer eine leicht erlernbare Schnittstelle für die entfernt betriebenen Hochleistungsrechner an die Hand zu geben. Im wissenschaftlichen Bereich ist der Endbenutzer typischerweise ein Wissenschaftler (Chemiker, Physiker, Ingenieur, ...), der für seine komplexen Simulationsrechnungen dringend den Zugriff auf schnelle Hochleistungsrechner benötigt. In der Regel wird er sich nicht dafür interessieren, auf welchem Rechner seine Anwendung gerade läuft, sondern vielmehr wie lange er auf das Ergebnis seiner Berechnung warten muß. Es wäre also wünschenswert, wenn er von der Spezifikation systemspezifischer Details (Prozessoranzahl und -typ, Hauptspeicherbedarf, Plattenplatz, usw.) befreit würde. Im Idealfall bräuchte er dem Grid System nur anzugeben, welche Anwendung mit welchen Parametern er ausführen möchte, nicht aber, auf welchem Hochleistungsrechner seine Anwendung laufen soll. Um dies zu ermöglichen, haben wir einen grafischen XML-Editor für GUIs entwickelt, mit dessen Hilfe sich der Endbenutzer die für seine spezifischen Bedürfnisse am besten

geeigneten Eingabe-Masken (Forms) selbst entwickeln kann (Abbildung 2.39). Die wichtigste Komponente unserer Software-Bibliothek ist ein GUI-Generator, der selbst auf einem GUI-System abläuft - daher der Name *GuiGen*.

GuiGen ist mit Java (inkl. Swing, JAXP, JFlex) und Perl implementiert. Es besteht aus etwa 15.000 Zeilen Code und läuft auf beliebigen UNIX-Systemen. Die Nutzung ist sehr einfach, da der Endnutzer in einem Gui-Editor mittels *drag-and-drop* eine auf seine speziellen Bedürfnisse abgestimmte Eingabe-Maske gestalten und für die spätere Nutzung abspeichern kann. Zur Übertragung der Parameter wird XML verwandt. Das Backend, das die Parameter in die für die Zielmaschine verständliche Kommandosprache (Skript) übersetzt, kann in sh, csh, Perl, Java, oder C geschrieben werden.

Alignment und Threading auf massiv-parallelen Rechnern

Bearbeitet von: Thomas Steinke, Michael Meyer, Alexander Reinefeld, Rene Heek, Marlies Gollnick

Kooperationspartner: Freie Universität Berlin; Humboldt-Universität zu Berlin; Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin Berlin-Buch; Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik; Technische Fachhochschule Berlin

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Mitte 2001 ist die Forschungsarbeit im Rahmen des vom BMBF über fünf Jahre geförderten „Berlin Center for Genome Based Bioinformatics (BCB)“ aufgenommen worden. Die Ziele des BCB sind

- Genom-Annotation und Wissensmanagement,
- Vorhersage von Struktur und Funktion von Genomprodukten,
- Modellierung von Zellprozessen.

Der Bereich Computer Science ist am BCB mit der Forscher-Nachwuchsgruppe „Alignment und Threading auf massiv-parallelen Rechnern“ beteiligt, deren Aufgabe es ist, effiziente algorithmische Methoden zur Vorhersage der 3D-Struktur von Proteinen zu entwickeln. Dazu ist die Kombination von Methoden des Sequenz-Alignments und des Threadings erforderlich. Der enorme Rechenaufwand der derzeit bekannten Algorithmen und die Menge der zu verarbeitenden Daten machen zudem den Einsatz von massiv-parallelen Rechnerarchitekturen erforderlich. Da gegenwärtig nur sehr wenige der Methoden und Programme in paralleler Form vorliegen, liegt eine unserer Hauptaufgaben in deren Parallelisierung und Portierung auf massiv parallele Systeme. Darüber hinaus sollen neue effiziente Algorithmen speziell für massiv parallele Rechnersysteme und Cluster mit verteiltem Speicher entwickelt werden. Dies schließt methodische Verbesserungen hinsichtlich der benutzten Wechselwirkungspotentiale in Bewertungsfunktionen des Threading mit ein.

Ein zweiter Schwerpunkt unserer Arbeiten liegt in der Entwicklung eines flexibel konfigurierbaren und offenen Rechenportals als Service für Bioinformatik-Anwendungen

im BCB-Verbund. Das Portal wird neben Sequenz-Alignment und Threading auch andere relevante Anwendungsleistung anbieten, wobei die entsprechenden Programme transparent für den Nutzer auf verteilten Hochleistungsrechnern und Cluster-Systemen ablaufen. Dynamische Lastbalancierung und Auswahl der für die Aufgabenstellung angemessenen Rechner-Ressourcen sind inhärenter Bestandteil des Service.

Unsere Arbeiten erfolgen in enger Abstimmung mit den Partnern im BCB. Insbesondere orientieren sich die Arbeiten an deren Anforderungen, die das High-throughput-Rechnen mit sehr großen Datenmengen erfordern. Methodisch bedingt wird die Zusammenarbeit mit der Nachwuchsgruppe *Konformationsdatenbanken für Virtuelles Screening* (siehe Projektdarstellung Schwerpunkt 2.2.1) am ZIB weitergeführt. Darüber hinaus wird eine enge Kooperation mit Gruppen an der Humboldt-Universität zu Berlin und dem Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik angestrebt.

Im Vorfeld dieser Aktivitäten wurde zunächst *BLASTN* bzw. die *BLAST*-Suite (NCBI) für paarweises Sequenzalignment so modifiziert, daß sie auf klassischen Parallelrechnern (z.B. vom Typ CRAY T3E) und auf lose gekoppelten Cluster-Systemen effizient ablaufen. Für die Entwicklung einer Softwareumgebung zur Strukturvorhersage aus Sequenzdaten wurden Basisalgorithmen für lokales, globales und semi-globales Alignment mit linearen, konvexen und konkaven Gap-Funktionen und beliebigen Bewertungsmatrizen als parallele Version in C++/MPI implementiert.

METACHEM

Bearbeitet von: Thomas Steinke, Alexander Reinefeld

Mit der Gründung der EU COST Action D 23 METACHEM (*Metalaboratories for Complex Computational Applications in Chemistry*), an der das ZIB 1999 beteiligt war, wird versucht, für verschiedene Arten von Molekülsimulationen entsprechende Rechenumgebungen zu schaffen, die in der Lage sind, geographisch verteilte Ressourcen zu nutzen. Diese Ressourcen umfassen sowohl die in den beteiligten Institutionen verfügbaren Rechner und Anwendungspakete als auch die vorhandene fachliche Expertise.

Das ZIB ist *Vice Chair* des Management-Komitees sowie nationaler Kontaktpunkt.

2.2.14 Cluster und Systemnetzwerke

STP - Scheduled Transfer Protokoll auf Gigabit Ethernet

Bearbeitet von: Sebastian Heidl, Jens Simon, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: Pekka Pietikainen (CERN); SGI (tw.)

Zur Verknüpfung der Rechenknoten eines Cluster verwendet man sogenannte Netzwerk-Adapterkarten, die über den PCI-Bus eine schnelle Prozesskommunikation ermöglichen. In sehr leistungsfähigen Systemen werden hierfür in der Regel Myrinet- oder SCI-Adapterkarten eingesetzt, die zwar sehr schnell aber auch rela-

tiv teuer sind. Wir haben ein neues Netzwerkprotokoll erprobt, das auf preiswerten Gigabit-Ethernetkarten läuft. Normalerweise wird auf Gigabit-Ethernet-Netzwerken das bekannte TCP/IP-Protokoll eingesetzt, das aber für die Kommunikation innerhalb von Clustern zu rechenzeitaufwendig und zu langsam ist. Das von uns benutzte Protokoll STP (*Scheduled Transfer Protocol*) ist ursprünglich von SGI für GSN-Adapterkarten entwickelt und später standardisiert worden.

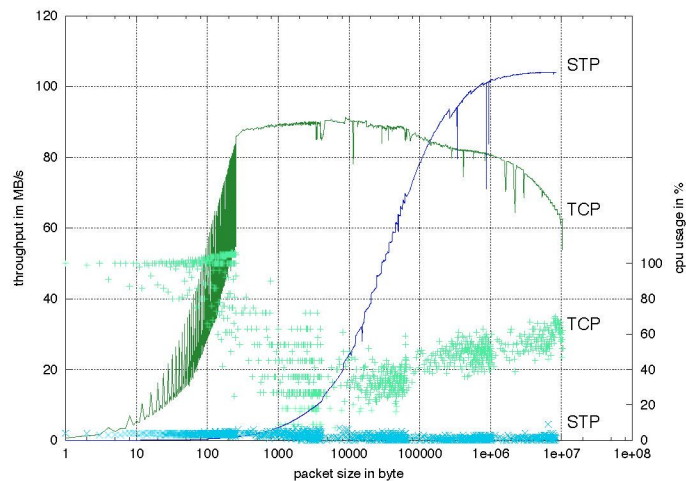


ABBILDUNG 2.40: Leistungsvergleich: STP- versus TCP auf Gigabit-Ethernet. Die durchgezogenen Linien oben zeigen den Durchsatz in MB/s, die Punktfelder unten die CPU-Belastung in Prozent.

STP ist ein verbindungsorientiertes Protokoll. Bevor ein Datenaustausch stattfinden kann, wird eine virtuelle Verbindung zwischen den Kommunikationspartnern aufgebaut. Sobald dies geschehen ist, stehen den Kommunikationspartnern Lese- und Schreib-Operationen mit Flußkontrolle (wie in TCP/IP) sowie Put-, Get- und Fetch-Operationen ohne Flußkontrolle zur Verfügung. Um Daten ohne zeitaufwendige Flußkontrolle übertragen zu können, müssen der Sender und der Empfänger vor der Kommunikation die Größe und Lage des Empfangspuffers aushandeln, erst anschließend kann die eigentliche Datenübertragung stattfinden.

Im Berichtszeitraum haben wir einen STP-Treiber für den schnellen Datentransfer bei Umgehung von Betriebssystemaufrufen (OS-Bypass) entwickelt. Die Abbildung 2.40 zeigt einen Vergleich zwischen STP und TCP, sowohl in Durchsatz (durchgezogene Graphen, linke Achse) als auch CPU-Belastung (Punkte im unteren Bereich, rechte Achse). Es fällt auf, daß kleine TCP-Pakete recht schnell übertragen werden, allerdings bei sehr hoher CPU-Belastung. Folglich steht der Prozessor während einer Datenübertragung mit TCP kaum noch für die Anwendung zur Verfügung. Anders im neuen STP-Protokoll. Hier wird die CPU nur sehr wenig belastet, da sie während der Datenübertragung keine Interrupts verarbeiten muss.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Peter Deuffhard

- Wahl zum Mitglied der Berlin–Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften

Christoph Helmberg

- Ruf auf eine C3-Professur für Wirtschaftsmathematik am Fachbereich Mathematik der Universität Kaiserslautern

Cornelia Kober

- Ruf auf eine C2-Professur an die Fachhochschule Kaiserslautern, Standort Zweibrücken, für das Fachgebiet Mathematik und Software–Engineering
- Ruf auf eine C2-Professur an die Fachhochschule Osnabrück, Fachbereich Maschinenbau, für das Fachgebiet Angewandte Mathematik und Informatik

Jens Lang

- Ruf auf eine C4-Professur an die Universität Darmstadt, Fachbereich Mathematik, für das Fach Mathematik mit Schwerpunkt Numerik partieller Differentialgleichungen

Alexander Reinefeld

- Ruf auf eine C4-Professur an die Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Informatik, für Praktische Informatik mit Schwerpunkt Parallele und verteilte Systeme

Roland Wessäly

- Mannesmann-Innovationspreis 2001

WISSENSCHAFTLICHE DIENSTLEISTUNGEN

3.1 Überblick

Die Aktivitäten im Arbeitsbereich Wissenschaftliche Dienstleistungen konzentrierten sich dieses Jahr auf den weiteren Ausbau des KOBV und des Math-Net-Projektes sowie auf Aktivitäten im Museumsbereich. Neu hinzugekommen ist das Projekt Math&Industry, das eine Verbesserung der Informationsbereitstellung konkreter Anwendungsprojekte in der Mathematik zum Ziel hat.

KOBV: Das Jahr 2001 brachte für den “Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg” (KOBV), dessen Projektphase Ende 2000 mit großem Erfolg abgeschlossen wurde, die lange angekündigte Institutionalisierung durch die Länder Berlin und Brandenburg. Allerdings dauerte es bis August 2001 bis die letzte noch fehlende Vereinbarung unterzeichnet wurde. Die Zentrale des neuen regionalen Bibliotheksverbundes KOBV wurde am ZIB eingerichtet, als Teil der Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme im Bereich Scientific Computing.

Dezidiertes Ziel der Landesregierungen in Berlin und Brandenburg ist es, die Informationsinfrastruktur in der Region neu zu organisieren und den besonderen Bedürfnissen des Wissenschafts- und Wirtschaftsstandortes Berlin-Brandenburg anzupassen. Beim Aufbau zeitgemäßer, nutzerorientierter Dienstleistungen für den Informationsbereich setzt der KOBV auf moderne Technologien, insbesondere auf das Internet. Im Berichtszeitraum konnte die Entwicklung der internet-basierten KOBV-Suchmaschine, die als technischer Kern des KOBV realisiert wurde, abgeschlossen und in einer 2. Version mit erweiterten und verbesserten Funktionalitäten in Betrieb genommen werden. Mitte 2001 hat die KOBV-Zentrale ihr nächstes ehrgeiziges Entwicklungsprojekt initiiert, den Aufbau einer digitalen Bibliothek für Berlin und Brandenburg. Das “KOBV-Informationportal” soll es künftigen Nutzern ermöglichen, mit einem Mausklick zwischen Dokumenten und in vielen Ressourcen zu navigieren und ein breites Angebot von Diensten, angefangen von der Fernleihe bis zum Pay per View elektronischer Zeitschriften, zu nutzen.

Math-Net: Die Internationalisierung des Math-Net wurde im letzten Jahr konsequent vorangetrieben.

Ziel des Math-Net-Projektes ist nach wie vor der Aufbau eines kostengünstigen und

nutzergesteuerten globalen Informationssystem für die Mathematik, das dem Wissenschaftler an seinem Arbeitsplatz den direkten und effizienten Zugriff auf aktuelle und qualitativ hochwertige Information ermöglicht, insbesondere auf

- Preprints und elektronische Publikationen,
- Abstracts und Referate,
- Software- und Datensammlungen und
- Information zu Personen und Projekten aus der Mathematik.

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 Extensible Markup Language (XML) und dem Resource Description Framework (RDF), deren Definition vom World Wide Web-Konsortium betrieben wird.

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 (HyREX und X-Harvest) entwickelt, an dem das ZIB von Beginn an beteiligt war.

Math&Industry: Mathematik wird immer mehr zur Schlüsseltechnologie in Industrie und Dienstleistungen. Die Darstellung der Projekte im Web ist allerdings noch unzureichend, sowohl was den Umfang der Informationen zu Projekten als auch die Qualität der Darstellung betrifft. Insbesondere der Anwendungsaspekt wird in den Web-Präsentationen der Projekte meist nicht ausreichend berücksichtigt. Die Verbesserung der Informationsbereitstellung über Projekte, die konkrete Anwendungen der Mathematik beinhalten, ist Ziel von Math&Industry. Der Service Math&Industry wendet sich vor allem an Vertreter aus der Industrie und dem Dienstleistungsbereich. Math&Industry soll auch dazu dienen, neue Anwendungsfelder für die Mathematik zu erschließen und neue Partner aus der Industrie und dem Dienstleistungssektor zu gewinnen.

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 Multi-Mediawerkzeugen an den Bedürfnissen einer Vielzahl auch kleinerer Museen ausrichtet und ihnen in einer Reihe von Projekten die Nutzung moderner Informationstechnik erschließt. 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 hat¹.

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

Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.7 des Computeralgebrasystems REDUCE weiterentwickelt, Fehler behoben und es wurden neue Anwendungsprojekte begonnen oder fortgeführt, die auf REDUCE basieren. Änderungen an verschiedenen Systemumgebungen machten erheblichen Aufwand bei der Pflege nötig.

Einen immer größeren Stellenwert für mathematische Software nimmt die Verfügbarkeit der Standards MathML des W3C und OpenMath ein. Dies kommt auch durch die Förderung des Esprit Thematic Networks OpenMath durch die EU zum Ausdruck. Durch die Entwicklung von REDUCE ist das ZIB daran beteiligt. Der Kick-off Workshop dieses Netzwerks fand am ZIB statt.

Weiterhin wurden die Distributionsmaterialien und die Dokumentation zur aktuellen Version weitgehend überarbeitet. Die vollständige Systemdokumentation ist im Internet erhältlich. Das User Manual und die Beschreibungen der einzelnen Module sind in Form von PDF Dateien abgelegt und können von den Benutzern mittels eines Browsers direkt eingesehen werden.

An der Organisation der internationalen Konferenz ISSAC 2001 in Kanada waren Winfried Neun und Walter Tietze als Publicity Chair beteiligt.

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, Dagmar Otto, Stefan Litsche, Hildegard Franck

Kooperationspartner: Bibliotheken aus der Region Berlin/Brandenburg

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

Der KOBV ist angetreten, um auf der Basis von Internet-Technologien zeitgemäße, nutzerorientierte Dienstleistungen für den Informationsbereich zu entwickeln und die Informationsinfrastruktur in der Region Berlin-Brandenburg neu zu organisieren. Mit der Institutionalisierung des KOBV haben die Länder Berlin und Brandenburg im Jah-

¹<http://www.dhm.de/datenbank>

re 2001 die rechtliche Basis für den Fortbestand dieser regionalen Service-Einrichtung geschaffen. Am 20. August 2001 unterzeichneten die beiden Länder und das ZIB die konstituierende Vereinbarung. Mit der Einrichtung der KOBV-Zentrale am ZIB und der Einberufung des KOBV-Kuratoriums am 23. Oktober 2001 haben die Struktur und der organisatorische Aufbau des KOBV im Berichtszeitraum Gestalt angenommen. Der KOBV wird von den Ländern Berlin und Brandenburg finanziert, wobei im Land Berlin eine Mischfinanzierung aus Landes- und Teilnehmerbeiträgen vereinbart wurde. Am Jahresende 2001 nahmen 19 Bibliotheken und Bibliothekssysteme sowie die beiden Verbände der öffentlichen Bibliotheken Berlins und Brandenburgs am KOBV teil.²

Die Eingliederung der Verbundzentrale ins ZIB und ihre Ansiedlung im Bereich Scientific Computing, Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme setzt die in der Projektphase bewährte Konstellation fort. Die KOBV-Zentrale nimmt Aufgaben zur Aufrechterhaltung des Betriebes, Dienstleistungsaufgaben und Aufgaben der Weiterentwicklung wahr. Sie ist in die Bereiche Bibliothekswesen und Informationstechnik gegliedert. Grundlegender methodischer Ansatz des KOBV ist die enge Verzahnung und gemeinsame Durchführung von Betriebs- und Entwicklungsaufgaben in der KOBV-Zentrale. Service und Entwicklung sollen zum gegenseitigen Nutzen zukunftsorientiert miteinander verbunden werden - eine wesentliche Bedingung zur Eingliederung der KOBV-Zentrale in die Forschungsumgebung des ZIB. Die Etablierung des Verbundes und seiner Gremien in der 2. Jahreshälfte 2001 bedeutete für die KOBV-Zentrale, die bereits zu Beginn des Jahres ihre Arbeit am ZIB aufgenommen, die betrieblichen Aufgaben fortgeführt und erste weiterführende Projektvorschläge mit den Bibliotheken diskutiert hatte, die Beendigung eines rund zehnmonatigen, teilweise schwierigen "Schwebezustandes". Bis zum Ende des Berichtszeitraumes konnte die KOBV-Zentrale personell fast vollständig ausgestattet werden. Angegliedert an die KOBV-Zentrale ist die Geschäftsstelle des Friedrich-Althoff-Konsortiums (FAK), des regionalen Zusammenschlusses der wissenschaftlichen Bibliotheken zur gemeinsamen Beschaffung von elektronischer Information.

Der Schwerpunkt der Aktivitäten der KOBV-Zentrale im Jahre 2001 bestand darin, die zweite Version der KOBV-Suchmaschine gemeinsam mit der Firma Ex Libris zur Produktionsreife zu entwickeln. Am 12. November 2001 ist diese Version in Betrieb gegangen - aufgrund von Performance-Problemen allerdings zunächst nur in Probebetrieb. Die KOBV-Zentrale ist damit die erste Einrichtung in Deutschland, die das neue Ex Libris-Produkt MetaLib, das auf den KOBV-Konzeptionen zur Suchmaschine basiert, eingesetzt hat. Mit der Gesamtabnahme der KOBV-Suchmaschine im Dezember 2001 ist die technische Entwicklung der KOBV-Suchmaschine - bis auf die Nachlieferung des Alert Service und die Lösung der Performance-Problematik durch die Firma Ex Libris - mit insgesamt anderthalbjähriger Verspätung abgeschlossen.

Hat die KOBV-Suchmaschine bereits in ihrer ersten Version entscheidend zur Verbes-

²Informationen zum KOBV unter: <http://www.kobv.de>

serung der Informationsinfrastruktur beigetragen, so ist mit der zweiten Version ein weiterer Qualitätssprung zu verzeichnen. Einen wesentlichen Fortschritt in der "neuen" KOBV-Suchmaschine stellen die erweiterten Möglichkeiten zur Einbindung von Datenbanken dar. In die KOBV-Suchmaschine können nun alle Bibliothekssysteme mit Web-OPAC eingebunden werden und die KOBV-Zentrale konnte das Angebot recherchierbarer Kataloge in der Suchmaschine entscheidend vergrößern. Im Berichtszeitraum hat sie den OPAC der Staatsbibliothek zu Berlin - Preußischer Kulturbesitz und die Kataloge der Fachhochschul-Bibliotheken mit Horizon-System in die KOBV-Suchmaschine eingebunden, zudem die Verbundkataloge aller deutschen Bibliotheksverbände, so dass Nutzer und Bibliothekare nun über die regionalen Bestände hinaus gleichzeitig in allen großen Bibliotheken Deutschlands suchen können. Gleichzeitig bietet die zweite Version der KOBV-Suchmaschine ein erweitertes Dienstleistungsspektrum durch verbesserte und erweiterte Web-Funktionalitäten, fachspezifische Auswahl von Bibliotheken sowie personalisierte Dienste mit nutzerdefinierten Suchprofilen.

Einen Wermutstropfen in die erfolgreiche Zusammenarbeit mit der Firma Ex Libris brachte die geplante Migration der fünf Berliner Konsortialpartner - Freie Universität, Humboldt-Universität, Universität der Künste, Technische Universität und ZIB - von der ALEPH Version 12.1 auf die Version 14.2. Aufgrund des nicht produktionsreifen Zustandes der von Ex Libris ausgelieferten Software konnte die ursprünglich für das erste Quartal 2001 vorgesehene Migration auch bis Ende des Jahres 2001 nicht durchgeführt werden und wird voraussichtlich erst im Herbst 2002 stattfinden. Für die Konsortialpartner bedeutet diese Verzögerung eine massive Behinderung in ihren Planungen. So kann die KOBV-Zentrale unter anderem aufgrund fehlender Konvertierungs- und Updateprogramme bis auf weiteres ihr Fremddatenangebot nicht erweitern und den Bibliotheken den umfangreichen und lange erwarteten Datenbestand der Library of Congress nicht als Fremddatenquelle zur Verfügung stellen.

Unter der Bezeichnung "KOBV-Informationsportal" hat die KOBV-Zentrale Mitte 2001 ihr nächstes ehrgeiziges Projekt initiiert, den Aufbau einer digitalen Bibliothek für Berlin und Brandenburg. Im Rahmen eines wissenschaftlichen Projektes wird die KOBV-Zentrale ein kooperatives Portal für die Region aufbauen, in dem zentrales Portal und lokale Portale nicht hierarchisch einander zugeordnet, sondern miteinander vernetzt sind. Mittels einer nutzerfreundlichen Navigation auf der Basis verlinkter Ressourcen und vernetzter Server soll das KOBV-Informationsportal geöffnet und erweitert und der Nutzer zu spezifischen Informationen und Diensten hingeführt werden. Die KOBV-Zentrale wird neueste Standards und Erkenntnisse aus der Internet-Technologie einsetzen und an deren Weiterentwicklung mitarbeiten, um dieses offene, vernetzte Portal zu realisieren. Als wesentliche Komponenten seien genannt:

- Einsatz von Linking-Mechanismen wie Dynamic Linking, Reference Linking, Open URL und
- Einsatz von Instrumenten zur dezentralen Authentifizierung und Abrechnung

über das Internet.

Das KOBV-Informationsportal wird eine qualitativ neue Dimension im Dienstleistungsangebot des KOBV und seiner Bibliotheken eröffnen: Künftig wird der Nutzer mit einem einfachen Klick zwischen Dokumenten und in vielen verschiedenen Ressourcen navigieren und von Fernleihe bis hin zum Pay per View elektronischer Zeitschriften ein breites Angebot von Diensten nutzen können. Die Detail-Konzeption des Portals werden KOBV-Zentrale und Bibliotheken in Stufe 2 des Projektes, die für 2002 vorgesehen ist, gemeinsam festlegen. Bis Ende 2003 soll das Projekt KOBV-Informationsportal abgeschlossen sein.

Als Vorbereitung auf die technische und inhaltliche Konzeption hat die KOBV-Zentrale in Stufe 1 des Projektes, die von Mitte 2001 bis Anfang 2002 terminiert ist, verschiedene Teilprojekte durchgeführt: Evaluation ausgewählter Portalsoftware sowie des Produktes SFX, Aufbau eines regionalen Bibliothekenführers, Problemanalyse Zeitschriften, Spezifikation der Anforderungen für die Fernleihe.

Aufbauend auf den positiven Erfahrungen während des KOBV-Projektes hat die KOBV-Zentrale ihre Politik der "transparenten Information und Kommunikation" weiter fortgesetzt. Nach Beendigung des KOBV-Projektes hat sie im 1. Quartal 2001 den KOBV-Informationsserver völlig überarbeitet, aktualisiert und mit speziellen Seiten für Nutzer und Bibliothekare weiter ausgebaut. Die KOBV-Hotline³, an die sich Nutzer und Bibliothekare bei akuten Problemen mit der KOBV-Suchmaschine bzw. bei allgemeinen Fragen zum KOBV oder zur KOBV-Suchmaschine wenden können, ist inzwischen als bewährtes Mittel etabliert. Die kurzen Reaktionszeiten, die rasche Fehlerbehebung sowie die schnelle und qualifizierte Beantwortung von Fragen finden allgemein äußerst positiven Anklang. Die hohe Akzeptanz, die diese Informationspolitik in der Region findet, haben die Bibliotheken nicht zuletzt durch die große Resonanz auf das 1. KOBV-Forum bestätigt. Das am 23. Oktober 2001 durchgeführte 1. KOBV-Forum war Auftakt zu einer Reihe von Informationstagungen, die die KOBV-Zentrale künftig einmal im Jahr veranstalten wird.

Publikationen

- [1] Martin Grötschel, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Beate Rusch: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*, in: *Bibliothek, Forschung und Praxis*, 25, 2001, Nr. 1, S. 55-65.
- [2] Monika Kuberek: *KOBV : institutionalisiert*. Vortrag auf dem 91. Deutschen Bibliothekartag 02. bis 05. April 2001 in Bielefeld. Textfassung: April 2001, in: *Bibliotheksdienst* 35 (2001), Heft 9, S. 1079-1088.
- [3] Monika Kuberek: *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Konzept, Erfahrungen, Ausblick*, in: . BSZ-Kolloquium am 09. und 10. Oktober

³KOBV-Hotline: kobv-zt@zib.de

2000 an der Universität Konstanz : Vorträge, Bibliotheksservice-Zentrum Baden-Württemberg, Konstanz 2001, S. 109-119.

3.2.2 Math-Net - ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Winfried Neun, 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

Im Mittelpunkt der Math-Net-Aktivitäten des letzten Jahres standen

- die Weiterentwicklung des Konzepts der Math-Net-Seite und
- die Entwicklung und Evaluierung eines entsprechenden Werkzeugs, das eine einfache Erstellung und Bearbeitung von Math-Net-Seiten zulässt

Die Idee der Math-Net Seite ist einfach. Die Math-Net Seite ist eigentlich nichts weiter als eine zusätzliche einheitliche Homepage für mathematische Fachbereiche, also ein standardisiertes Portal für die Web Sites mathematischer Fachbereiche.

Diese standardisierten Seiten vereinfachen - durch die Verwendung gleicher Inhalte und Strukturen - die Navigation für den Nutzer.

Andererseits soll die Math-Net-Seite die qualifizierte maschinelle Auswertung der Web Sites der Fachbereiche ermöglichen. Dafür werden moderne Konzepte und Techniken im Web eingesetzt: Die Math-Net Seite ist ein XML-Dokument. Die Metadaten - wichtige Voraussetzung für die qualifizierte maschinelle Erschließung - sind im RDF-Format (Resource Description Framework) codiert. Um die internationale Verbreitung der Math-Net Seite zu unterstützen, sind beliebige Zeichensätze zugelassen, die dann für die weitere Verarbeitung nach UNICODE konvertiert werden.

Eine Voraussetzung für die angestrebte weltweite Verbreitung der Math-Net Seite ist das Vorhandensein eines Werkzeugs zur einfachen Erstellung der Math-Net Seiten. Dieses Werkzeug, der Math-Net Page Maker⁴, wurde im letzten Jahr am ZIB entwickelt und - unter Beteiligung vieler Fachbereiche - evaluiert.

Das Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) der International Mathematical Union (IMU) hat kürzlich eine Empfehlung zur Installation der Math-Net Seiten an wissenschaftlichen Institutionen verabschiedet⁵.

Math-Net Seiten sind ein erster Schritt für eine bessere Erschließung der verteilt vorliegenden Informationen mathematischer Institutionen. Es gilt jetzt, die Math-Net Seiten an möglichst vielen mathematischen Institutionen zu installieren und den Zugang zu

⁴<http://www.math-net.org/pagemaker>

⁵<http://www.math-net.org/Math-Net-Recommendation.html>

diesen Informationen zu verbessern. Ein weiteres Projekt, das demnächst in Angriff genommen werden soll, ist die Entwicklung von Math-Net Seiten für die Homepages von Personen.

Mit einer weltweiten Verbreitung der Math-Net Seiten für mathematische Institutionen, Personen und Preprints sowie den entsprechenden Diensten Navigator, PERSONA MATHEMATICA und MPRESS entstehen die Grundlagen für neue, nutzergesteuerte IuK-Systeme in den Wissenschaften. Das ZIB ist eine der führenden Institutionen in der Math-Net-Initiative und an vielen Math-Net-Aktivitäten wesentlich beteiligt.

Math-Net muss interoperabel und kompatibel zu anderen wissenschaftlichen Informationssystemen sein. Deshalb beteiligen sich DMV und ZIB an der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften seit ihrer Gründung. Die Ansätze und Erfahrungen im IuK-Bereich und speziell in der Math-Net-Initiative werden auf den Tagungen der IuK-Initiative regelmäßig vorgestellt und es wird - auf der konzeptionellen und technischen Ebene - eine enge Zusammenarbeit über die Grenzen der wissenschaftlichen Disziplinen hinaus angestrebt. So hat das ZIB am Positionspapier "Digitale Bibliotheken" der IuK-Initiative⁶ zu den künftigen Anforderungen an die wissenschaftliche Information und Kommunikation mitgearbeitet.

Im Rahmen der IuK-Initiative wird ein gemeinsames Projekt zu digitalen Bibliotheken vorbereitet.

3.2.3 **Math&Industry - Anwendungen der Mathematik im Web**

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Wolfram Sperber

Kooperationspartner: Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück; Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg; Fachbereich Mathematik der Universität Freiburg

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Mathematische Methoden werden immer mehr zur Grundlage für neue Produkte, Verfahren und Dienstleistungen. Die in den Projekten erzielten Ergebnisse sind zum großen Teil innovativ, sowohl in den mathematischen Verfahren als auch in den Anwendungen.

Die qualitative und quantitative Verbesserung der Informationen über Projekte, die konkrete Anwendungen der Mathematik beinhalten, ist erklärtes Ziel des Projekts. Die Bereitstellung qualifizierter Informationen über Projekte soll dazu beitragen, der Mathematik neue Anwendungsfelder in Industrie und Dienstleistungen zu erschließen. Math&Industry soll vor allem Ingenieure, Techniker, Mathematiker und Manager aus der Industrie und dem Dienstleistungsbereich ansprechen.

Math&Industry ist – wie Math-Net – als ein verteiltes Informationssystem konzipiert. Grundlage von Math&Industry sind die Informationen der Projekte. In der ersten Phase wurden verschiedene Anwendungsprojekte analysiert. Im Ergebnis der Analyse wur-

⁶<http://www.iuk-initiative.org/documents/digbib09092001>

de ein Entwurf erarbeitet, der die relevanten Inhalte von Anwendungsprojekten der Mathematik benennt und eine Struktur für deren Aufbereitung vorschlägt. Der Entwurf soll jetzt für reale Projekte erprobt werden. Der nächste Schritt ist dann, daß alle Projekte des BMBF-Mathematikprogramms ihre Informationen anhand der Empfehlungen aufbereiten und im Web präsentieren. Dazu werden Werkzeuge entwickelt, die die Projekte bei der Bereitstellung der Informationen unterstützen.

Für den effizienten Zugriff über alle Projekte wird ein zentrales Portal aufgebaut. Dieses Portal fasst die Informationen der Projekte durch automatische Verfahren zusammen und verarbeitet diese. Das Portal, das vom ZIB zusammen mit dem Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück entwickelt wird, bietet dem Nutzer insbesondere verschiedene Sichten und Suchmöglichkeiten über die Projektinformationen. Für das Jahr 2002 ist die Entwicklung eines ersten Prototyps von Math&Industry vorgesehen, der im Web öffentlich zugänglich sein wird.

3.2.4 CARMEN: Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten

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. Für die meisten akademischen Benutzer nicht direkt sichtbar, vollzieht sich z.Z. ein weiterer großer Umbruch im WWW. Das betrifft in erster Linie die Benutzung von XML als Dokumentenformat sowie die Verwendung von RDF zur Beschreibung von Metadaten.

XML ermöglicht auf relativ einfache Art und Weise die Erzeugung strukturierter Dokumente. RDF ist ein Modell, Metadaten als gerichtete Graphen aufzufassen. Damit wird eine tiefgehende semantische Erschließung digitaler Dokumente ermöglicht. RDF erlaubt eine Codierung in XML.

Die Erstellung von strukturierten Dokumenten, die durch Metadaten erschlossen sind, ist eine wesentliche Voraussetzung für ein qualifiziertes Retrieval.

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 Institutionen sollen ihre Informationen in strukturierter Form erzeugen, durch Metadaten erschließen und auf ihren Servern bereitstellen. Durch Akkumulation und Selektion werden daraus dann spezielle Informationsdienste aufgebaut.

Das CARMEN-Content Analysis, Retrieval and MetaData: Effective Networking-Projekt mit seinen insgesamt 9 Teilprojekten ist für das Math-Net die Basis, neue Methoden und Verfahren zu entwickeln und zu adaptieren.

Im Arbeitspaket 7 (Ein System für das Referenzieren und Verknüpfen von Dokumenten), wird ein integriertes Hypertext- und Retrievalsystem (HyREX) für XML-Dokumente entwickelt, das für verteilte, heterogene Umgebungen geeignet ist. Das System unterstützt eine Reihe von Such- und Browsing-Strategien und die Suche sowohl in Metadaten als auch in Volltexten. HyREX soll mittelfristig das bisherige im Math-Net verwendete Textretrievalsystem Harvest/Glimpse ersetzen.

HyREX selbst fokussiert auf den Textretrievalanteil. 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. Das Sammeln und Zusammenführen verteilter vorliegender Internetressourcen geschieht über das in Carmen entwickelte X-Harvestsystem. X-Harvest wurde um diverse Funktionalitäten erweitert (XML- und OAI-Schnittstelle).

Im Zuge der fortschreitenden Internationalisierung müssen moderne elektronische Informationssysteme heute "multilingual" sein, d.h. die verschiedenen weltweit eingesetzten Zeichensätze interpretieren können. Das führte in AP7 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.

Innerhalb des Projekts sind diverse Softwarekomponenten entwickelt und Testinstallationen erstellt worden.

Das Modul any2utf erlaubt die Konvertierung eines beliebig verwendeten Zeichensatzes in die Standard UNICODE-Codierung utf8. Das Modul bibtex.sum ist Teil des X-Harvest Systems und extrahiert Metadaten aus BibTeX-Quellen, die im Wissenschaftsbereich vielfach vorhanden sind.

Die Testinstallationen haben gezeigt, das HyREX ähnlich performant wie das bisher eingesetzte Harvest/Glimpse System ist, doch bietet HyREX wichtige Komponenten, die vergleichbare Systeme nicht haben, wie relevanz-orientierte Suche, Ranking und das Indexieren von XML-Dokumenten auf Basis des W3C-Standards XQuery.

3.2.5 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: Carlos Saro, Regine Stein, Doris Jung, Stephan Orth

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); Kulturhistorisches Museum Rostock; Stadtgeschichtliches Museum Leipzig

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 Comitee 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 über Möglichkeiten und Probleme des Datenaustauschs 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). Im Berichtszeitraum wurden weitere Verträge mit dem Kulturhistorischen Museum in Rostock sowie mit dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig abgeschlossen. 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 sowie an der Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur (HTWK) Leipzig im Einsatz, um exemplarisch Lösungswege für Probleme der Inventarisierung aufzuzeigen.

Die in den vergangenen Jahren entwickelten Internet-Datenbanken wurden im Jahr 2001 wiederum quantitativ ausgebaut und funktional erweitert.

Die bereits im Sommer 1996 eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen Historischen Museums⁷ umfaßt dank der kontinuierlichen Verbesserung und Erweiterung inzwischen über 160.000 Datensätze mit etwa 110.000 digitalisierten Objektbildern. Sie bildet damit ungebrochen das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Die Nutzung liegt mit 2.000 – 4.000 Anfragen pro Woche weiterhin sehr hoch. Auch

⁷<http://www.dhm.de/datenbank>

die Internet-Datenbank des Bildarchivs am Deutschen Historischen Museum⁸ mit der Möglichkeit zur Bestellung von Bildern über das Internet erfreut sich dieser guten Akzeptanz (auch hier 2.000 – 4.000 Anfragen pro Woche).

Die am ZIB betriebene Internet-Datenbank des Deutschen Hygiene Museums Dresden konnte 2001 durch ein Projekt stark erweitert werden. <http://www.dhmd.de/> Eine technisch vom ZIB betreute Datenbank zur Erschließung mitteldeutscher Plastik am Institut für Kunstgeschichte der Universität Halle wurde 2001 offiziell freigegeben.⁹

3.2.6 REDUCE

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Herbert Melenk, Walter Tietze (bis April 2001)

Kooperationspartner: Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Californien, USA); Wolfram Koepf (Universität / GH Kassel); James H. Davenport, John P. Fitch (University of Bath, England); Arthur C. Norman (Cambridge, England); Eberhard Schrüfer (GMD, Bonn); Andreas Dolzmann, Thomas Sturm (Universität Passau); Francis Wright, Thomas Wolf (Queen Mary College, London, U.K.); Beiträge von zahlreichen Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien und vielen europäischen Ländern.

Förderung: Europäische Union

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 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.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Dadurch konnten im Bereich der Algorithmen zur symbolischen Lösung von Gleichungssystemen und Berechnung von Gröbnerbasen 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

⁸<http://www.dhm.de/datenbank/bildarchiv.html>

⁹<http://minerva.kunstgesch.uni-halle.de>

mathematischen Vorkenntnisse der Studenten des Colleges weiterentwickelt. Dieses 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. Nach dem Wechsel des ZIB-Fellows im Jahre 2001 zur Brock University in Kanada soll das System auch dort installiert und für die dortigen Bedürfnisse angepasst werden.

In Zusammenarbeit mit der Fa. R.O.S.E. GmbH wurde weiterhin an der Integration von REDUCE in das System Rodon 2 gearbeitet. Dabei kommunizieren die Systeme mittels MathML über eine neu erstellte Unterprogrammschnittstelle. Das kombinierte System hat inzwischen Produktionsreife erreicht.

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 Union 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 von der EU in Brüssel genehmigt. Der Kick-off Workshop dieses Projekts fand im ZIB statt.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 43.000,- 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.

SUPERCOMPUTING UND NETZE

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, 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 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), der nunmehr absehbaren Ablösung durch das HLRN-System (s. Abschnitt 4.2) und eines zu hohen Preis-/Leistungsverhältnisses sind im Jahr 2001 ursprünglich vorgesehene Ausbaumaßnahmen zurückgestellt worden.

4.1.1 Systemkonfiguration und Software-Ausstattung

Systemkonfiguration

Parallelrechner CRAY T3E

Die hohe Auslastung des Parallelrechners blieb im Berichtszeitraum gegenüber dem Vorjahr praktisch konstant. Zugleich wurde jedoch von einigen Benutzern das bereits in 2000 beobachtete Verfahren verstärkt eingesetzt, sehr große Datenmengen über längere Zeit online zu bearbeiten (Jobketten). Durch eine Verdopplung des Dateisystems /work (auf 530 GByte) im November 2001 konnte der Engpaß beim Plattenspeicher schließlich behoben werden. Ferner konnte ein weiterer MPN (Multi-Purpose Node) in Betrieb genommen werden. Durch diese Maßnahme wurde die Fehlerrate im I/O-Bereich erheblich gesenkt. Das im April 2000 auf der CRAY T3E eingeführte *Autoboot and Monitoring Feature* ist weiterhin sehr erfolgreich im Einsatz.

Im Berichtszeitraum traten 15 (Vorjahr: 43) außerplanmäßige Unterbrechungen auf, die Ausfallzeit betrug 25 h (150 h), das sind ca. 0,3% der Kalenderzeit. Sieben Unterbrechungen wurden durch fehlerhafte Hardware, acht durch fehlerhafte Software verursacht; die betriebstechnischen Voraussetzungen waren äußerst stabil.

	Parallelrechner CRAY T3E	Vektorrechner CRAY J90
Prozessoren	408 ¹ 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	1046 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	5 SCSI mit je 20 MByte/s	4 Tape Channel Adapter mit je 20 MByte/s
Netzanschlüsse	FDDI mit 12,5 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 unverändert. Auch sein Nutzungsspektrum – speicherintensive Anwendungen mit geringer Parallelisierung – blieb im wesentlichen konstant. Die Prozessorauslastung lag im Berichtsjahr bei 56%, die mittlere Speicherauslastung betrug jedoch 67%, wobei an einzelnen Tagen Durchschnittswerte von 93% erreicht wurden.

Datenhaltungssystem STK 9310

Das im Januar 2000 modernisierte Datenhaltungssystem (Umbau der Robotertechnik auf STK 9310, PowderHorn) konnte im Berichtsjahr ein weiteres Mal verbessert werden: Es wurden zehn neu entwickelte Magnetbandgeräte vom Typ STK 9940A mit einer Datentransferrate von 10 MByte/s und einer mittleren Zugriffszeit von 41 s installiert, die zugehörigen Magnetbänder (beschrieben mit 288 Spuren) haben eine Kapazität von 60 GByte.

¹Erweiterung auf **544 Prozessoren** im Februar 2002, Spitzenleistung 524 GFlop/s

Für Backup- und Archivierungsdienste standen im Dezember 2001 ca. 3200 Magnetbänder mit insgesamt ca. 192 TByte Kapazität (ohne Berücksichtigung von Kompression) zur Verfügung.

Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner liefern die Tabellen 4.2 und 4.3. Als weiteres Programm zur Strömungssimulation wurde StarCD installiert.

	Parallelrechner CRAY T3E LC 384	Vektorrechner CRAY J932/16
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++ Tools C++ MathPack 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
Ingenieurwiss.	FLUENT, StarCD	ABAQUS, 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 Prog.	Kraftfeld-Prog.
AMBER, DGauss GAMESS (UK) NWChem TURBOMOLE	ACES II, CADPAC CRYSTAL 92 DGauss GAMESS (UK) GAMESS (US) Gaussian 98 MOLPRO 96	AMPAC MNDO 97 MOPAC	GROMOS 96

Tabelle 4.3: Chemie-Pakete auf den Hochleistungsrechnern.

4.1.2 System- und Netzsicherheit

Zu den besonders sicherheitskritischen Vorfällen im Berichtszeitraum gehörte die weltweite Verbreitung des *Nimda*-Wurms, der sich durch eine bis dahin nicht gekannte Kombination von Verbreitungsstrategien auszeichnete. Besonders durch diesen Vor-

fall wurde das Augenmerk auf den Infektionsweg über die Benutzung von Internet-Browsern gerichtet, die im Laufe des Jahres zunehmend zum Angriffsziel ausgehend von bereits infizierten Webseiten wurden. Es zeigte sich bald, daß auf Arbeitsplatzrechnern mit Standardbetriebssystemen, wie sie auch im ZIB weit verbreitet sind, regelmäßige Sicherheitspatches der Internet-Browser erforderlich sind.

Bereits länger bekannt ist die Bedrohung durch E-mail Viren. Die Abwehrtechnik gegen diese Viren scheint inzwischen ausgereift. Durch den Einsatz von Antiviren-Paketen, wie sie auch im ZIB angewendet werden, kann dieser Gefährdung weitgehend sicher begegnet werden, wenn für eine regelmäßige Aktualisierung der zugehörigen Virendatenbanken gesorgt wird.

Auf weiterhin hohem Niveau liegt die Bedrohung durch schädliche Software, welche einen als *Buffer Overflow* bezeichneten Fehlertyp in der Serversoftware verschiedener Hersteller ausnutzt, um unberechtigten Zugang zu einem System zu erlangen. Durch den inzwischen hohen Automatisierungsgrad bei der Installation eines Systems weiß ein Administrator nicht immer, welche Dienste er auf seinem Rechner betreibt und welche Angriffsmöglichkeiten er damit bietet. Nicht zuletzt diese Situation war ausschlaggebend für den 'Erfolg' des *Nimda*-Wurms. Für die Rechner des ZIB werden deshalb regelmäßig *Port Scans* durchgeführt, durch welche von außen eingeschleuste Software identifiziert wird, um sie dann außer Betrieb zu nehmen.

4.1.3 Zulassungsausschuß und ausgewählte 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 (vgl. Organigramm in 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 2001 noch stärker auf die Großprojekte konzentriert: Es wurden im ZIB 63 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 1.868 „*ZIB Parallelrechner Leistungseinheiten*“ (ZPL)² aufgenommen werden, dies sind 21% mehr als im Vorjahr. Die Anzahl der Projekte ist gegenüber dem Vorjahr um fünf gestiegen. Mit dieser Tendenz wird den Vorgaben des Wissenschaftsrates und der Deutschen Forschungsgemeinschaft, ausschließlich große Projekte auf

²Eine ZPL entspricht 16 Prozessorstunden auf der CRAY T3E

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. 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 2001 lagen Anträge auf ca. 61.000 ZPL und damit Wünsche über fast die dreifache Leistung des Rechners vor.

Großprojekte

Das Spektrum der Nutzerschaft hat sich gegenüber dem Vorjahr nicht verändert. Der Zulassungsausschuß hat im Berichtszeitraum neben 50 Projekten aus den Berliner Universitäten auch sechs Projekten aus Universitäten in den Neuen Bundesländern sowie vier Projekten aus sonstigen wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Rechenzeit in nennenswertem Umfang zugeteilt. Ferner wurde im Vorgriff auf den HLRN-Verbund je einem Projekt der Universitäten in Hannover und Kiel aus dem Kontingent des Zulassungsausschusses außerhalb der Kontingente der zugehörigen Bundesländer Rechenzeit bewilligt.

Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugeteilten Rechenzeitkontingenten. Im Berichtszeitraum verteilte sich der Gesamtverbrauch der Berliner Großprojekte auf die vier Fachgebiete wie folgt (in Klammern jeweils die Werte aus dem Vorjahr): Chemie 40% (27%), Physik 30% (28%), Ingenieurwissenschaften 16% (33%) und Geowissenschaften 14% (12%). Die neuen Projekte aus dem Fachgebiet Biologie nahmen weiterhin nur wenig Rechenzeit auf.

Die folgenden elf größten Projekte im Jahr 2001 auf der CRAY T3E haben jeweils für einen Zeitraum von bis zu zwölf Monaten 82.050 ZPL bewilligt bekommen, das sind ca. 70% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Zulassungsausschuß bewilligten Rechenkapazität:

- Geowissenschaften: *Hochauflösende Modellierung der thermohalinen Zirkulation*, CAU Kiel, 12.000 ZPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik katalytisch relevanter Systeme*, HU Berlin, 10.500 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: *Periodische sowie Cluster- und Embedded Cluster-Rechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität unterschiedlicher Vanadiumoxidaggregate mit Ab-initio-Methoden*, HU Berlin, 8.000 ZPL.

- Geowissenschaften: *Akustische Tomographie der atmosphärischen Grenzschicht zur Validierung eines LES-Modells*, Universität Hannover, 7.000 ZPL.
- Chemie: *Alkalimetalle als Promotoren in der heterogenen Katalyse am Beispiel der CO-Oxidation auf der cäsiierten RU(0001) Oberfläche*, FU Berlin, 5.500 ZPL.
- Chemie: *Anorganische Moleküle und Cluster in Astrophysikalischen Staubbildungsprozessen*, TU Berlin, 5.500 ZPL.
- Physik: *Neutron Production in Laser Irradiated Foils at Ultra-high Intensities*, Max-Born-Institut Berlin, 4.550 ZPL.
- Physik: *Eigenwerte und Eigenfunktionen in der QCD mit $N_f=2$ dynamischen Fermionen*, FU Berlin, 4.500 ZPL.
- Physik: *Optoelektronische Eigenschaften von Halbleiterquantenpunkten*, TU Berlin, 4.000 ZPL.

Exemplarisch stellen wir im folgenden einige der oben aufgeführten Großprojekte vor. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektbearbeitern verfaßt worden.

Hochauflösende Modellierung der thermohalinen Zirkulation im Nordatlantischen Ozean

Bearbeitet von: C.W. Böning und J. Dengg (Institut für Meereskunde, Kiel)

Die Dynamik großräumiger ozeanischer Bewegungen wird entscheidend mitbestimmt von Prozessen auf vergleichsweise kleinen räumlichen Skalen. So ist die thermohaline (d.h. von Erwärmung/Abkühlung und Niederschlag/Verdunstung angetriebene) beckenweite Umwälzbewegung im Nordatlantik, die einen Teil des sogenannten globalen "Conveyor Belt" darstellt, dominiert von westlichen Randströmen (z.B. Golfstrom) und Durchströmungsvorgängen in engen Passagen (z.B. zwischen Grönland und Island) mit einer Skalenbreite von nur 20–100 km.

Die Wechselwirkungen zwischen groß- und kleinskaligen Vorgängen sind bisher aber nur ungenügend verstanden, was die Interpretation von Beobachtungen der ozeanischen Variabilität und insbesondere die Vorhersage des Ozeanverhaltens in Klimaprognosen beeinträchtigt.

Numerische Ozeanmodelle ermöglichen es, gezielte Prozeßstudien zur Dynamik dieser Wechselwirkungen vorzunehmen. Erforderlich sind hierfür aber Modellrechnungen, die sowohl die beckenweiten Skalen (>1000 km) als auch die lokalen Prozesse (<10 km) erfassen. Dem wird in diesem Projekt durch eine Gitterauflösung des Nordatlantischen Ozeans mit $1021 \times 1416 \times 45$ (= 65 Millionen) Modellpunkten auf derzeit 202 Prozessorelementen der Cray T3E am ZIB Rechnung getragen. Die so erreichte horizontale Auflösung von 5 km erlaubt erstmalig sinnvolle Vergleiche mit auf Forschungsschiffen gesammelten Beobachtungen:

Abbildung 4.1 zeigt als Beispiel die vom Modell errechnete Temperatur- und Strömungsverteilung in 288 m Tiefe in der Labradorsee, zusammen mit dem Meßgebiet der im Juni 2001 durchgeführten Expedition des Forschungsschiffes *Meteor*. Noch während die Messungen an Bord des Schiffes durchgeführt wurden, konnten die beobachteten Strukturen mit den hier gezeigten Daten des hochauflösenden Modells verglichen werden. Es ergab sich in vieler Hinsicht weitgehende Übereinstimmung der modellierten Felder mit den Meßdaten. Insbesondere war es möglich, anhand des Modells die beobachtete warme Gegenströmung zum küstennahen, südostwärtigen Labradorstrom als einen Ausläufer des Nordatlantischen Stroms zu identifizieren, der warmes Wasser aus dem Subtropenwirbel von Südosten bis in die Labradorsee führt.

Allerdings wurden auch Unzulänglichkeiten des benutzten Modells deutlich, die nun in weiterführenden Arbeiten behoben werden müssen. Nur eine derartige "Eichung" der numerischen Modelle durch Messungen auf hoher See ermöglicht es, die Qualität numerischer Ozeansimulationen fortwährend zu verbessern und so ihren Wert als Werkzeug zum Verständnis der ozeanischen Dynamik zu erhöhen.

Diese Arbeiten sind Teil internationaler Großprojekte (CLIVAR) und nationaler Vorhaben (SFB 460 der Universität Kiel, *Dynamik thermohaliner Zirkulationsschwankungen*).

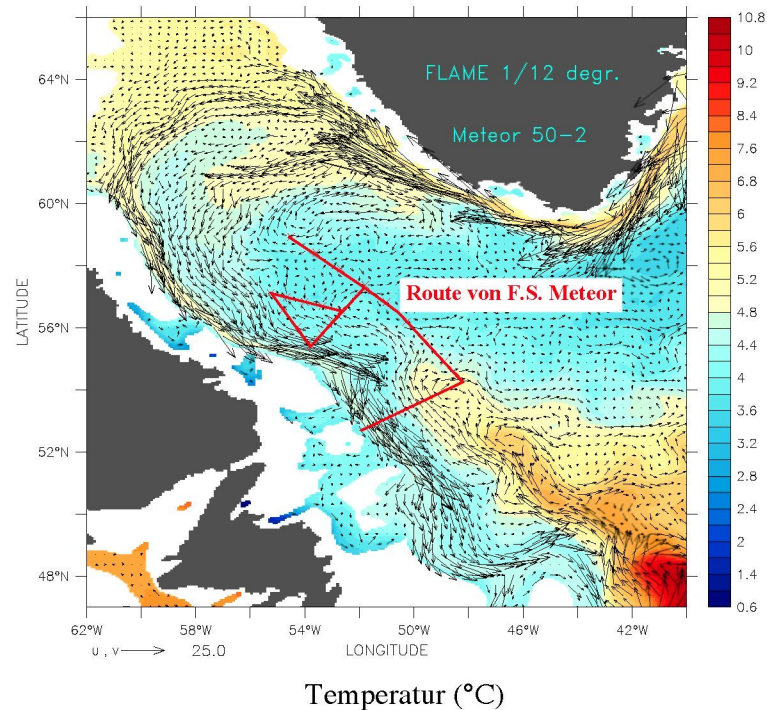


ABBILDUNG 4.1: Karte des Jahresmittels der modellierten Temperatur- (°C) und Strömungsverteilung (cm/s) in 288m Tiefe in der Labradorsee. (Nur jeder 4. Vektor gezeigt.) Die durchgezogene Linie markiert das Meßgebiet der *Meteor*-Reise M50-2 im Juni 2001.

Raum-zeitliche Strukturbildung in den zirkumstellaren Hüllen kühler Sterne

Bearbeitet von: E. Sedlmayr, P. Woitke, K.S. Jeong, J.M. Winters und C. Helling (TU Berlin)

Moderne Beobachtungsmethoden haben in den letzten Jahren zu der Überzeugung geführt, daß Gas- und Staubmassen in astrophysikalischen Objekten in der Regel eine wolkenartige Struktur aufweisen.

Ziel dieses Projekts ist es, diese Strukturbildungsphänomene durch mehrdimensionale Simulationen zu verstehen. Die Modellrechnungen umfassen einen mehrdimensionalen Kontinuums-Strahlungstransport mittels eines Monte-Carlo-Verfahrens sowie eine zeitabhängige Beschreibung des Gasphasen-Festkörperübergangs.

Die Abbildung 4.2 zeigt Resultate einer solchen Struktursimulation.

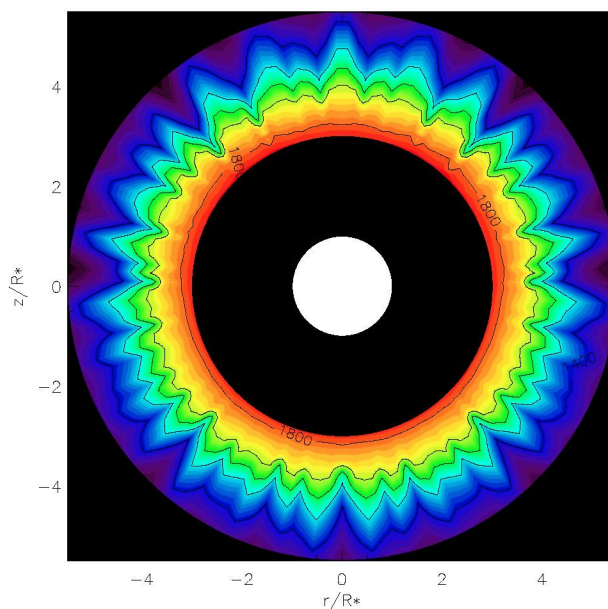


ABBILDUNG 4.2: Der weiße Kreis in der Mitte repräsentiert den zentralen Stern, die äußeren Regionen die zirkumstellare Hülle.

Periodische sowie Cluster- und Embedded Cluster-Rechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität unterschiedlicher Vanadiumoxidaggregate mit ab initio-Methoden

Bearbeitet von: Joachim Sauer (Humboldt-Universität zu Berlin)

Vanadiumoxide werden industriell in der heterogenen Katalyse als Sauerstoffüberträger z.B. bei der Schwefelsäureherstellung oder in der Petrochemie eingesetzt. Zur Erhöhung der katalytischen Aktivität werden sie oft auf Trägermaterialien wie z.B. Aluminiumoxid aufgetragen.

Im Projekt werden systematische Studien verschieden großer Cluster von Vanadiumoxiden in der Gasphase sowie von deponierten Vanadiumoxidfilmen (siehe Abbildung 4.3) durchgeführt, um den Einfluß des Trägermaterials auf die katalytische Aktivität zu beschreiben.

Das am ZIB bearbeitete Projekt leistet einen wesentlichen Beitrag zu den Teilprojekten A4 und C5 im Sonderforschungsbereich 546 „Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetallaggregaten“, an dem seit Juli 1999 Institute aus allen Berliner Universitäten und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen beteiligt sind.

Im Projekt wurden zunächst Strukturen von $(V_2O_5)_n$ Clustern ($n=1-12$) in der Gasphase untersucht und mit experimentellen Strukturen des Festkörpers verglichen [1,2]. Dabei wurden vorrangig Methoden der Dichtefunktionaltheorie (DFT) und Kombina-

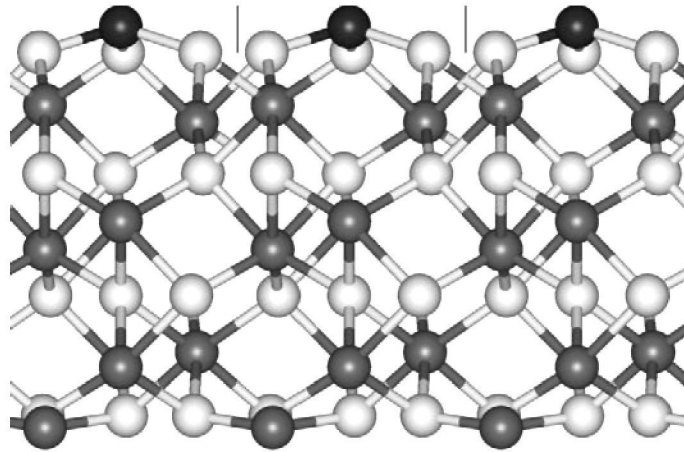


ABBILDUNG 4.3: Optimierte Struktur eines $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_3$ -Films mit 4 Al-O-Al-Schichten (äußere Al-Atome durch V-Atome ersetzt).

tionen aus DFT für die Cluster und analytischen Potentialfunktionen für eine periodische oder nichtperiodische Umgebung angewendet. Auf den Rechnern des ZIB wurden dazu die Programme TURBOMOLE und QMPOT eingesetzt.

Da Cluster dieser Größe noch keine Festkörpereigenschaften aufweisen, wird angestrebt, Vanadiumoxidfilme als in zwei Richtungen periodische Systeme zu behandeln. Aufgrund der Zielstellung des Projekts kommt dem Einsatz von Moleküldynamiksimulationen (MD) mit quantenmechanischen Potentialen (CPMD) besondere Bedeutung zu. Im Projekt wurden bisher anhand von DFT-Rechnungen Pseudopotentiale für Al und V erzeugt und an idealen Oberflächen von $\text{V}_2\text{O}_5(001)$, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$, V_2O_3 auf $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (siehe Abbildung 4.3) und von V_2O_5 auf $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ getestet.

Bei Nutzung des CPMD-codes 3.4.1. auf der Cray-T3E des ZIB sind dazu die in Tabelle 4.4 gezeigten Ressourcen notwendig.

Literatur:

1. J. Sauer und S.F. Vyboishchikov, *Gas-phase vanadium oxide anions: Structure and detachment energies from density functional calculations*. J. Phys. Chem. A 104 (2000), 10913-10922.
2. J. Sauer und S.F. Vyboishchikov, *$(\text{V}_2\text{O}_5)_n$ gas phase clusters ($n=1-12$) compared to V_2O_5 crystal: DFT calculations*. J. Phys. Chem. A 105 (2001), 8588-8598.

System	Rechnung	Zellvolumen [Å ³]	Cutoff [Ry]	ZPL mit 200 App-PE
Al ₂ O ₃ -V ₂ O ₃ (3x3x1) hexagonal	Single point, 1 Iteration	2708	80	2.1
Al ₂ O ₃ -V ₂ O ₃ (3x3x1) hexagonal	Single point, vollständig	2708	80	173.3
V ₂ O ₅ [0011100]	Single point, 1 Iteration	1853	120	4.4
V ₂ O ₅ [0011100]	Single point, vollständig	1853	120	157.7

Tabelle 4.4: Beispiele für Ressourcenanforderungen für typische molekulare Systeme mit CPMD-3.4.1 auf CRAY T3E des ZIB

Akustische Tomographie der atmosphärischen Grenzschicht zur Validierung eines LES-Modells

Bearbeitet von: S. Weinbrecht, S. Raasch (Institut für Meteorologie und Klimatologie, Hannover)

Grobstruktursimulationsmodelle, kurz LES (Large-Eddy Simulation)-Modelle genannt, können atmosphärische Strömungen, insbesondere turbulente Wirbel bis hin zu wenigen Metern Größe auflösen. Vergleiche von LES-Simulationsergebnissen mit experimentell gewonnenen Daten sind allerdings rar. Während LES-Modelle hochaufgelöste dreidimensionale Datenfelder liefern, deren einzelne Gitterwerte Mittelwerte über das jeweilige Gittervolumen darstellen, liegen Meßdaten meist als lokale Punkt- oder Linienmessungen vor, die für den Vergleich zunächst entsprechend aufbereitet werden müssen.

Mit dem Verfahren der akustischen Tomographie ist man nun in der Lage, Temperatur- und Windfelder in ihrer räumlichen Verteilung zu ermitteln. Dabei wird die Abhängigkeit der Schallgeschwindigkeit von der Lufttemperatur und dem Wind ausgenutzt. Die Temperatur- und Windfelder liegen auf einem Gitter von 50 m Kantenlänge vor, wobei die einzelnen Gitterwerte hier ebenfalls Flächen- oder Volumenmittel über ein Gittervolumen darstellen. Damit liefert die akustische Tomographie experimentelle Daten in einem für den Vergleich mit LES-Modellen optimalen Format.

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Meteorologie der Universität Leipzig wird im Rahmen dieses Projektes unter Verwendung des akustischen Tomographieverfahrens und der LES-Simulationstechnik die Entwicklung konvektiver Strukturen in einer bodennahen Luftschicht untersucht und in diesem Zusammenhang eine Validierung des hier verwendeten Modells PALM (PARallelisiertes LES-Modell [1]) anhand von Meßdaten durchgeführt.

Da das Prinzip der LES-Modellierung darauf beruht, daß nur die für das untersuch-

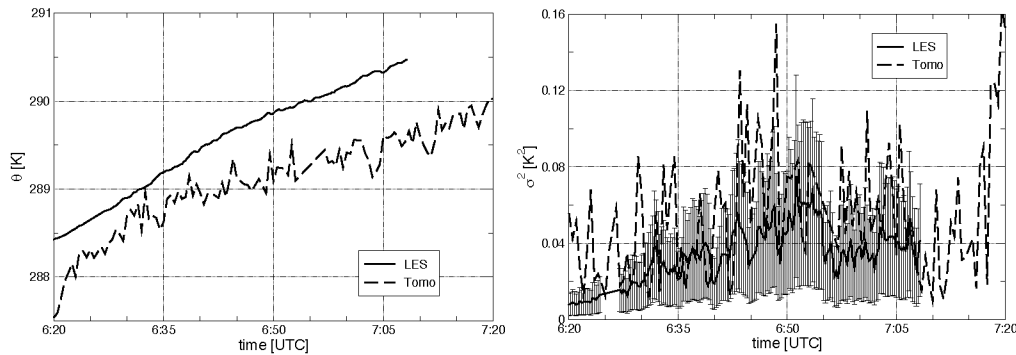


ABBILDUNG 4.4: Mittlere potentielle Temperatur in K (links) und räumliche Temperaturvarianzen in K^2 (rechts), durchgezogene Linie: LES-Daten, gestrichelte Linie: Tomographiedaten. Der graue Bereich gibt die Ungenauigkeit in den simulierten Varianzen an, die sich aus Ungenauigkeiten in den Modelleingangsparametern ergeben.

te Phänomen relevanten turbulenten Wirbel aufgelöst und die übrigen auf möglichst einfache Weise parametrisiert werden, liefern LES-Modelle auch nur dort verlässliche Ergebnisse, wo sie Turbulenzelemente zu mindestens 80 - 90 % auflösen. Um das LES-Modell also unabhängig vom gewählten Verfahren der subskaligen Parametrisierung validieren zu können, muß die Auflösung des LES-Modells so gewählt werden, daß in der Vergleichshöhe turbulente Wirbel bereits vom Modell aufgelöst werden.

Für den Vergleichslauf wird das Modell mit einer Gitterweite von 0,5 m in alle drei Raumrichtungen und einem Modellgebiet von $700 \times 700 \times 350$ Gitterpunkten betrieben. Die Rechnung wird auf 350 Prozessoren durchgeführt.

Da über homogenem Untergrund Auf- und Abwindgebiete zufällig verteilt sind, werden für den Vergleich nicht die Temperaturfelder direkt, sondern die statistischen Momente der räumlichen Temperaturverteilung herangezogen, insbesondere der räumliche Mittelwert und die Varianz.

Abbildung 4.4 zeigt den räumlichen Mittelwert der potentiellen Temperatur und die räumliche Temperaturvarianz im Vergleichszeitraum. Tomographie- und LES-Daten zeigen eine qualitative Übereinstimmung, allerdings gibt es quantitative Abweichungen.

Einige der möglichen Gründe für die Abweichungen der Varianzen aus simulierten und gemessenen Temperaturfeldern sind bereits bekannt: So führt der bei der akustischen Tomographie verwendete Algorithmus zur Rekonstruktion von Temperatur- und Windfeldern aus der effektiven Schallgeschwindigkeit zur Überschätzung der Temperaturvarianzen bei gleichzeitiger Unterschätzung der Windvarianzen. Außerdem lassen vergangene Simulationen vermuten, daß bei weiterer Reduzierung der Gitterweite die simulierten Varianzen zunehmen.

Den Einfluß dieser Fehlerquellen soweit wie möglich zu quantifizieren, ist daher neben der genaueren Analyse der simulierten hochaufgelösten turbulenten Strukturen im weiteren Aufgabe im Rahmen des gemeinsamen Projekts unseres Instituts mit dem Leipziger Institut für Meteorologie.

Literatur:

1. Raasch, S. and M. Schröter, **PALM** – A Large-Eddy Simulation Model performed on Massively Parallel Computers. *Meteorol. Z., NF.*, 5:363–372, 2001.

Eigenwerte und Eigenfunktionen in der QCD mit $N_f = 2$ dynamischen Fermionen

Bearbeitet von: QCDSF-Kollaboration: V. Bornyakov (IHEP Protvino); M. Göckeler (Uni Regensburg); R. Horsley, T. Kovacs, D. Pleiter, G. Schierholz (DESY Zeuthen); V. Linke (FU Berlin); P. Rakow (Uni Regensburg); T. Streuer (Uni München); H. Stüben (ZIB)

Im Rahmen dieses Projektes werden die niedrigen Eigenwerte sowie die zugehörigen Eigenfunktionen des Dirac-Wilson-Operators für Eichfelder mit dynamischen Quarks berechnet. Abbildung 4.5 zeigt ein typisches Ergebnis. Die erforderlichen Eichfeldkonfigurationen wurden von den QCDSF und UKQCD (Großbritannien) Kollaborationen erzeugt. Die Eigenwerte liefern Informationen über die topologischen Eigenschaften der jeweiligen Eichkonfigurationen und erlauben somit Rückschlüsse auf die dynamischen Eigenschaften des Vakuums. Zu den grundlegenden physikalischen Fragestellungen, die hier untersucht werden sollen, gehören der Ursprung der chiralen Symmetriebrechung und der Zusammenhang mit topologischen Anregungen der Eichfelder. Schließlich wird der Einfluß von niedrigen Eigenmoden auf physikalische Observablen wie hadronische Korrelatoren betrachtet. Es gibt starke Hinweise darauf, daß die niedrigen Eigenmoden bei hinreichend kleinen Quarkmassen dominierenden Einfluß auf die Eigenschaften dieser Observablen haben. Um den Einfluß der dynamischen Quarks bestimmen zu können, werden Vergleichsrechnungen mit Eichkonfigurationen ohne Quarks durchgeführt. Die nicht-hermitische Dirac-Wilson-Matrix hat auf den betrachteten Vo-

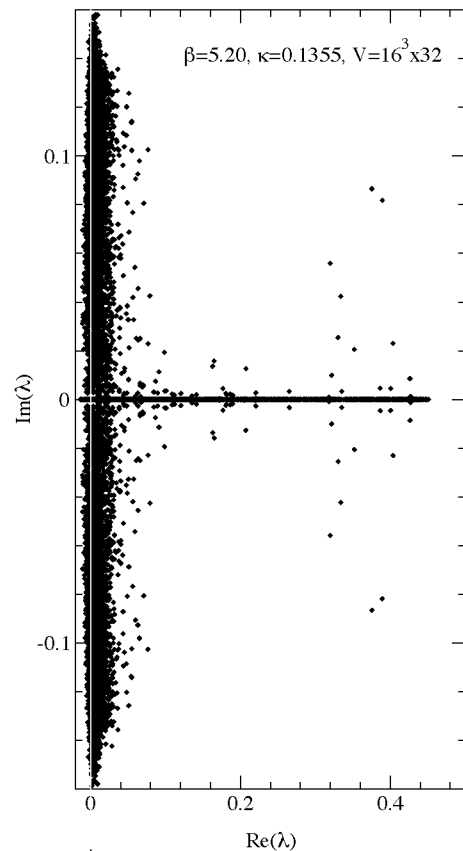


ABBILDUNG 4.5: Beispiel einer Eigenwertverteilung.

lumina eine Dimension $O(1.5 \times 10^6)$, sie ist jedoch nur sehr dünn besetzt. Zur Berechnung der Eigenwerte sind iterative Verfahren erforderlich. Angewendet wird das *Implicit Restarted* Arnoldi-Verfahren, wobei die Konvergenz mit Hilfe einer polynomialen Prädiktionierung (erheblich) beschleunigt wird.

Optoelektronische Eigenschaften von Halbleiterpunkten

Bearbeitet von: Dieter Bimberg, Andrei Schliwa und Oliver Stier (TU Berlin)

Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 296 „Wachstumskorrelierte Eigenschaften niederdimensionaler Halbleiter“ werden in diesem Projekt Berechnungen der Energiestruktur von Quantenpunkten durchgeführt. Die physikalischen Zusammenhänge in

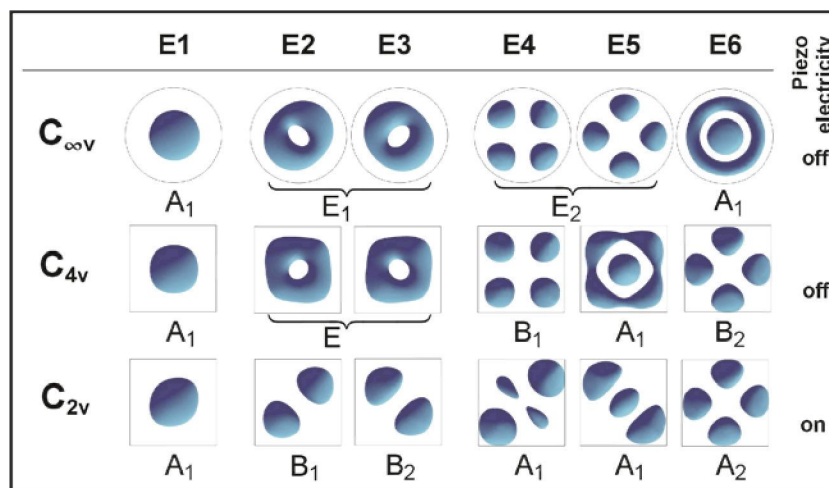


ABBILDUNG 4.6: Einfluß der Symmetrie auf den Charakter elektronischer Zustände klassifiziert nach irreduziblen Darstellungen der unterliegenden Symmetriegruppe.

realen Halbleiternanostrukturen sind überaus komplex (siehe Abbildung 4.6) und erfordern eine aufwendige Modellierung in der Art, wie sie hier erfolgt. In den vergangenen Jahren eingesetzte vereinfachende Ansätze haben sich als wesentlich zu ungenau erwiesen. Selbst die derzeit besten theoretischen Modelle – und dazu gehört die hier implementierte 8-Band-kp-Theorie – sind in mancher Hinsicht von approximativem Charakter und bedürfen einer expliziten Verifikation ihrer Vorhersagegenauigkeit. Dies ist in diesem Jahr geschehen: Durch Inbetriebnahme eines neuen STM-Mikroskops an der TU-Berlin hat sich die Datenlage hinsichtlich geometrischer Gestalt und chemischer Zusammensetzung von Quantenpunkten erheblich verbessert. Das erlaubte es erstmalig, Geometrie und Komposition mit den resultierenden gemessenen Spektren zu assoziieren und theoretisch nachzubilden. Es wurden die Sensitivität der Ergebnisse bezüglich der Variation einiger als besonders kritisch eingestufte Parameter untersucht und Schlüsse für das letztlich interessierende Probenwachstum gezogen.

4.2 Norddeutscher Hochleistungsrechner (HLRN-Verbund)

Mit der Auswahl eines geeigneten Rechnersystems ist der *Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)* dem Ziel der Beschaffung eines massiv-parallelen Hochleistungsrechners für die Standorte ZIB/Berlin und RRZN/Hannover im Berichtszeitraum einen entscheidenden Schritt vorangekommen. Nach der positiven Begutachtung der entsprechenden HBFG-Anträge durch die DFG im Vorjahr konnte die Beschaffung im Rahmen einer europaweiten Ausschreibung mit Verhandlungsverfahren eingeleitet werden. Zur fachlichen Bewertung der eingehenden Angebote wurde ein Auswahlausschuß gegründet, dem wichtige Nutzer des HLRN-Systems aus den sechs norddeutschen Länder angehörten.

Nachdem auf die erste Ausschreibung im April 2001 nur zwei nicht mit den Vergabungsunterlagen konforme Angebote eingegangen waren, wurde eine zweite Ausschreibung Anfang Juni 2001 durchgeführt. Auf diese Ausschreibung gingen fünf Angebote ein. Mit allen Herstellern sind in mehreren Runden Verhandlungen geführt worden, wobei sich letztlich das Angebot der Firma IBM nach den Kriterien des HLRN als technisch und wirtschaftlich am besten geeignet herausgestellt hat und daher diesem Angebot der Zuschlag erteilt werden sollte.

Verkompliziert wurde der Beschaffungsvorgang durch die Tatsache, dass eine Firma auf das Vorabinformationsschreiben, das der HLRN-Verbund gemäß §13 der Vergabeverordnung den Herstellern der nicht ausgewählten Angebote zugesandt hat, einen Nachprüfungsantrag bei den beteiligten Vergabekammern in Berlin und Niedersachsen sowie später auch eine Beschwerde in zweiter Instanz eingelegt hat. Der Nachprüfungsantrag wurde inhaltlich allerdings zurückgewiesen und die Beschwerde hat sich als gegenstandslos erwiesen. Beide Vergabekammern haben dem HLRN eine faire und technisch einwandfreie Auswahl gemäß den vorab veröffentlichten Kriterien bescheinigt. Trotz dieses positiven Ergebnisses bleibt ein negativer Aspekt bestehen: die zeitliche Verzögerung der Beschaffung sowie der enorme Aufwand des Vergabenachprüfungsverfahrens, in das alle Parteien (einschließlich der Anwaltskanzleien) sehr viel Zeit und Energie in das Verfassen umfangreicher Schriften und die Vorbereitung und Durchführung der mündlichen Verhandlungen eingebracht haben. Der endgültige Zuschlag für die beiden HLRN-Komponenten (ZIB/Berlin und RRZN/Hannover) erfolgte Ende Januar 2002 und die Vertragsunterzeichnung fand Mitte März 2002 statt.

Zwar konnte bereitsein anderer Erfolg gefeiert werden: Die Unterzeichnung des HLRN-Verwaltungsabkommens. In der Präambel heißt es „Die Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein schließen dieses Verwaltungsabkommen über die gemeinsame Förderung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in der Absicht, die bestehende regionale Infrastruktur in Wissenschaft und Wirtschaft durch den Aufbau und Betrieb eines Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN-Verbund) als gemeinsame Verbundaufgabe zu verbessern.“ Damit wurde dem HLRN am 04. Juli 2001 eine langfristige Perspektive gegeben, die weit über die Beschaffung des genannten Hochlei-

stungsrechners hinausgeht.

Obwohl der Vertragsabschluß nicht in den Berichtszeitraum fällt und das Rechnersystem erst im April 2002 installiert wurde, seien hier schon die wesentlichen Eckdaten des ausgewählten Systems genannt: IBM pSeries 690 bestehend aus 24 RegattaH-Knoten mit je 32 Power4 CPUs (1,3 GHz) die über ein schnelles Verbindungsnetzwerk miteinander verbunden sind, ca. 2 Terabyte Hauptspeicher, sowie einem dedizierten Storage Area Netzwerk (SAN) mit separaten Servern und ca. 52 Terabyte SAN Plattenspeicherplatz. Mit seinen insgesamt 768 Power4-CPU's bietet das System eine Spitzenleistung von ca. 4 TeraFlop/s.



ABBILDUNG 4.7: Im Vorgriff auf den Jahresbericht 2002: Frohe Gesichter von Vertretern der Fa. IBM, der Berliner Wissenschaftsverwaltung und des ZIB nach der HLRN-Vertragsunterzeichnung im März 2002.

4.3 Fachberatung

Das im Jahresbericht 1996³ eingehend beschriebene Konzept der Fachberatung für die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte als „*HPSC-Lotsen*“ hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird zunehmend von anderen HPC-Zentren übernommen. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater⁴ des ZIB zugeordnet (siehe Tabelle 4.5).

Die wichtigsten Aufgaben der Fachberater sind:

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

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

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Hans-Hermann Frese Wilhelm Vortisch
Chemie	Dr. Bernd Kallies - ab 1.1.2002 Dr. Thomas Steinke
Informatik	Michael Meyer Thomas Röblitz Florian Schintke Dr. Jens Simon - bis 30.9.2001
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Portierung und Optimierung	Klaus Ketelsen - bis 31.8.2001

Tabelle 4.5: Fachberater im ZIB.

- 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.

4.3.1 Chemie und Bioinformatik

Ein gutes Drittel aller Großprojekte bearbeitete Themenstellungen aus dem Bereich Chemie (22 Projekte) oder Biologie (2 Projekte). Der Zuwachs beim Anteil der abgegebenen Rechenzeit auf dem Parallelrechner CRAY T3E blieb erhalten: 40% der

Rechenzeit wurden von Chemieprojekten konsumiert. Vorzugsweise *CPMD*, *TURBOMOLE* und *NWChem* wurden für nicht-empirischen Molekülberechnungen auf der CRAY T3E genutzt.

Speicherintensive quantenchemische Rechnungen mit *Gaussian* waren dominierend auf dem Vektorrechner CRAY J90.

Anorganische Cluster-Strukturen

Bearbeitet von: Thomas Steinke

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

Die Arbeiten zur Bestimmung der energetischen und strukturellen Verhältnisse von kleinen anorganischen Molekülclustern, die bei astrophysikalischen Nukleationsprozessen eine Rolle spielen, wurden weitergeführt. Die Untersuchungen von aluminiumhaltigen Clustern wurden um Berechnungen von $(\text{AlN})_x$ -Cluster komplettiert [1, 2]. Darauf aufbauend wurden Dichtefunktionalrechnungen (BP86) an käfigartigen Strukturen des Typs $(\text{XY})_x$ ($X=\text{Al, Ga, Sb}$; $Y=\text{N, As, Sb}$; $x=12, 24, 60$) durchgeführt, die theoretische Hinweise auf die Existenz stabiler hochsymmetrischer Strukturen liefern.

Publikationen

- [1] Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *A density functional study of small $(\text{AlN})_x$ clusters: structures, energies, and frequencies*, Chem. Phys. **271** (2001), 283-292.
- [2] Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *Computational evidence for stable inorganic fullerene-like structures of ceramic and semiconductor materials*, Chem. Phys. Lett. **350** (2001), 399-404.

4.3.2 Geowissenschaften

Das Fachgebiet Geowissenschaften umfaßt die Projekte aus dem Bereich Umweltwissenschaften einschließlich dessen Randgebieten 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 weiter 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 28% gegenüber dem Vorjahr (24%) weiter gesteigert. Auch der Vektorrechner wird wieder mehr genutzt.

Dieser Zuwachs wurde insbesondere durch typische Anwendungen aus dem Bereich der norddeutschen Küstenländer bewirkt. Im Vorgriff auf den HLRN wurde einem meteorologischen Projekt aus Hannover ein größeres Kontingent aus dem vom Zulas-

sungsausschuss verwalteten Anteil bewilligt. Für das Jahr 2002 sind weitere Projekte dieser Art aus dem HLRN-Verbund zu erwarten.

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.

4.3.3 Ingenieurwissenschaften

Die Anzahl der aktiven Großprojekte ist im Berichtszeitraum leicht auf 14 zurückgegangen. Der Anteil der abgenommenen Rechenzeit für das Fachgebiet hat sich aus unterschiedlichen Gründen mit 16% nahezu halbiert. Einige der Großprojekte mit signifikantem Rechenzeitverbrauch wurden ohne Nachfolgeprojekte abgeschlossen. Die Ungewißheiten und Verzögerungen im Zusammenhang mit der Verfügbarkeit des HLRN-Systems haben eine wichtige Nutzergruppe dazu bewogen, vorübergehend verstärkt die Ressourcen des HLRB zu nutzen. Außerdem wurde ein in der Arbeitsgruppe vorhandenes PC-Cluster kräftig ausgebaut.

Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) setzen ihre selbstgeschriebenen Forschungscode 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 auch in diesem 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 Ingenieurwissenschaften

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. Er ist außerdem Mitglied des universitären Forschungsschwerpunkts *Fluidsystemtechnik*⁵ an der TU Berlin.

⁵<http://www.tu-berlin.de/fst>

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, auch bei den NVV-Partnern) und in Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel-Computing*).

4.3.4 Physik

Die Zahl der bearbeiteten Großprojekte aus dem Bereich Physik liegt mit 17 im Rahmen der vorangegangenen Jahre. Diese Großprojekte haben etwa 30% der auf der CRAY T3E abgegebenen Rechenzeit verbraucht, was ebenfalls den vergangenen Jahren entspricht.

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.

Aktivitäten in diesem Jahr waren die weitere Optimierung des Produktionsprogramms für die Hitachi SR8000 des Leibniz-Rechenzentrums in München, der Start eines neuen Projektes zur Untersuchung der sogenannten Aoki-Phase der Gitter-QCD sowie die Mitorganisation der internationalen Gitterfeldtheorie-Konferenz *Lattice 2001*, die vom 19.–24. August an der Humboldt-Universität zu Berlin stattfand.

4.4 Projekte im Bereich Weitverkehrsnetze

4.4.1 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 (Abbildungen 4.8 und 4.9) und stellt für die meisten von ihnen auch den Anschluß an das deutsche Wissenschaftsnetz G-WiN und an das Internet her.

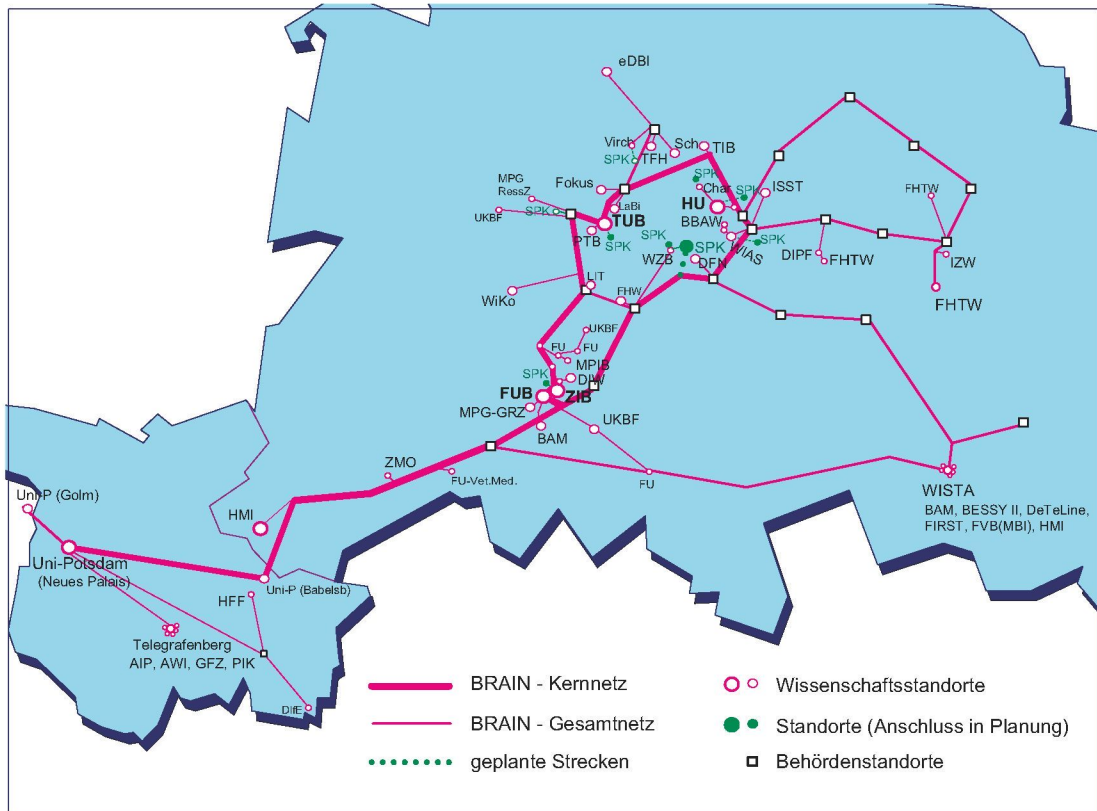


ABBILDUNG 4.8: Das Glasfasernetz von BRAIN.

Die Funktion von BRAIN als Verbundnetz hat sich in den vergangenen Jahren etwas gewandelt: Waren ursprünglich vor allem solche Wissenschaftseinrichtungen angeschlossen, die sich durch ein hohes Datenaufkommen (etwa bei der Nutzung externer Rechner) auszeichneten, so hat sich BRAIN in den letzten Jahren zu einem ganz normalen Kommunikations- und Verkehrsnetz entwickelt, das nicht nur Institutionen aller wissenschaftlichen Fachrichtungen berücksichtigt, sondern gleichermaßen auch den kulturellen Einrichtungen, wie Museen, Archiven oder Bibliotheken, zur Verfügung steht. Für die oft kleinen Einrichtungen ohne spezielle informationstechnische Ausrüstung und Ausrüstung hat die Anbindung an den „BRAIN-Verbund“ auch den Vorteil, daß sie vom Know-how der anderen profitieren können.

Den großen Einrichtungen aus Wissenschaft und Kultur bietet BRAIN die Möglichkeit, ihre in der Stadt bzw. in der Region verteilten Standorte untereinander zu vernetzen. Hiervon haben vor allem die Fraunhofer-Gesellschaft, die über BRAIN ein eigenes virtuelles LAN betreibt, sowie der Forschungsverbund Berlin und die Max-Planck-Gesellschaft - mit ihren Institutsstandorten sowohl in Berlin als auch in Potsdam - Gebrauch gemacht.

Verwaltet wird BRAIN von der BRAIN-Planungsgruppe, die als zentrales Steuerungsorgan von der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur eingerichtet worden ist. Der BRAIN-Planungsgruppe gehören Mitarbeiter der drei Universitäten und des ZIB an. 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 sind Fasern mit einer Gesamtlänge von ca. 2.000 km für BRAIN bzw. die angeschlossenen Wissenschafts- und Kultureinrichtungen reserviert. Diese Fasern werden zu ca. 25% für die G-WiN-Anbindung der Einrichtungen genutzt, zu ca. 36% für regionale Verbindungen unter BRAIN-eigenem Management und zu ca. 39% von den angeschlossenen Einrichtungen für interne Verbindungen.

Das von BRAIN genutzte Glasfasernetz konnte im Jahre 2001 wiederum ausgebaut werden. Neu angeschlossen wurden die Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften und das benachbarte Wissenschaftsforum in Berlin-Mitte, das Institut für Zoo- und Wildtierforschung in Friedrichsfelde sowie das Zentrum Moderner Orient in Nikolassee.

Als wichtigste Erweiterung konnte außerdem die sog. Südschiene zwischen Zehlendorf und Adlershof in Betrieb genommen werden. Die Herstellung dieser ca. 33 km langen Faserstrecke wurde nicht zuletzt dadurch ermöglicht, dass sechs Wissenschaftseinrichtungen (BAM, BESSY, FIRST, FVB, HMI und HU) sich mit unterschiedlichen Beiträgen an der Finanzierung der neuen Strecke beteiligten. Durch die Südschiene ergeben sich für das Berliner Wissenschaftsnetz drei neue Anschlußpunkte, Adlershof, Lankwitz und Zehlendorf, so daß künftig die Zahl der redundanten Netzverbindungen und damit die Ausfallsicherheit im Fehlerfall erhöht werden kann.

In 2001 begannen auch die planerischen Vorarbeiten für die nächste große Erweiterung zur Anbindung von insgesamt 10 Standorten der Stiftung Preußischer Kulturbesitz. Im Rahmen dieser Erweiterung wird es auch eine Veränderung in der Topologie des LWL-Netzes geben. In der Staatsbibliothek am Kulturforum wird ein neuer Netzknoten in das Kernnetz von BRAIN eingefügt, so daß sich die Bedingungen für weitere Anschlüsse in Berlin-Mitte dadurch verbessern dürften.

4.4.2 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 Übergang auf das G-WiN hat auch das Jahr 2001 noch einmal sehr stark geprägt, nicht zuletzt deshalb, weil es bei der Realisierung immer wieder zu Verzögerungen

gekommen war, da die neue Netz- und Überwachungstechnik nicht rechtzeitig geliefert werden konnte oder fehlerhaft war. Die eigentliche Migration nach G-WiN zwischen Ende Juni und Ende September verlief dagegen erfreulich problemlos. In diesen drei Monaten wurden sukzessive die Verbindungen zu den neuen G-WiN-Netzknoten und zu den daran angeschlossenen Teilnehmern aufgebaut, und die nicht mehr benötigten B-WiN-Verbindungen abgebaut, um jeweils für weitere G-WiN-Verbindungen verwendet zu werden. Für einen gleichzeitigen Betrieb beider Netze hätten die verfügbaren Faserstrecken nicht ausgereicht.

Der Wechsel zum G-WiN als neuem Höchstleistungsnetz des DFN brachte zahlreiche technische Neuerungen mit sich, vor allem den erstmals dominierenden Einsatz von SDH-Technik. Der DFN-Verein hat für die in seiner Verantwortung liegenden G-WiN-Zubringerstrecken die benötigten Leitungen von BRAIN (bzw. auf Potsdamer Gebiet aus dem von der Universität Potsdam betriebenen Netz) angemietet, wo immer es möglich war. In den vier Universitäten (FU, HU, TU und UP) werden SDH-Multiplexer und IP-Router betrieben; an vier weiteren Standorten in Berlin (T-Nova, TFH, WIAS und WISTA) sowie an zwei Standorten in Potsdam (Telegrafenberg und Heizkraftwerk) sind SDH-Multiplexer eingesetzt.

Um die Ausfallsicherheit für die angeschlossenen Teilnehmer zu erhöhen, ist mit dem DFN vereinbart worden, ein zusätzliches regionales IP-Management unter Einbeziehung der im BRAIN angelegten Ringstruktur zu installieren. Bei den Vereinbarungen mit dem DFN ist das ZIB als Vertragspartner aufgetreten, in treuhänderischer Ausübung für BRAIN und in Vertretung der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur.

Im Rahmen der Verträge über das zusätzliche IP-Management werden alle über BRAIN-Fasern angeschlossene Teilnehmer mit Geräten einer höheren Bandbreitenklasse ausgestattet, als es dem jeweiligen Vertragstarif entspricht. Außerdem wird der regionale Verkehr der BRAIN-Anschlüsse untereinander von der für den Teilnehmer geltenden Volumenberechnung abgezogen. Dieser Abzug vom Volumen kann allerdings nicht individuell erfolgen, sondern es wird das Verhältnis zwischen regionalem und überregionalem Verkehr aller BRAIN-Teilnehmer gemessen und der Prozentsatz bei jedem einzelnen Teilnehmer in gleicher Höhe berücksichtigt.

4.4.3 Classical 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 noch aus den früheren BRTB-Projekten (Berlin Regional Testbed) stammende sog. „Classical BRAIN“ war in den vergangenen Jahren zu einem in eigener Regie betriebenen regionalen Netz ausgebaut worden. Es dient den wissenschaftlichen Einrichtungen vor allem zur Vernetzung ihrer in Berlin und Potsdam verstreuten Stand-

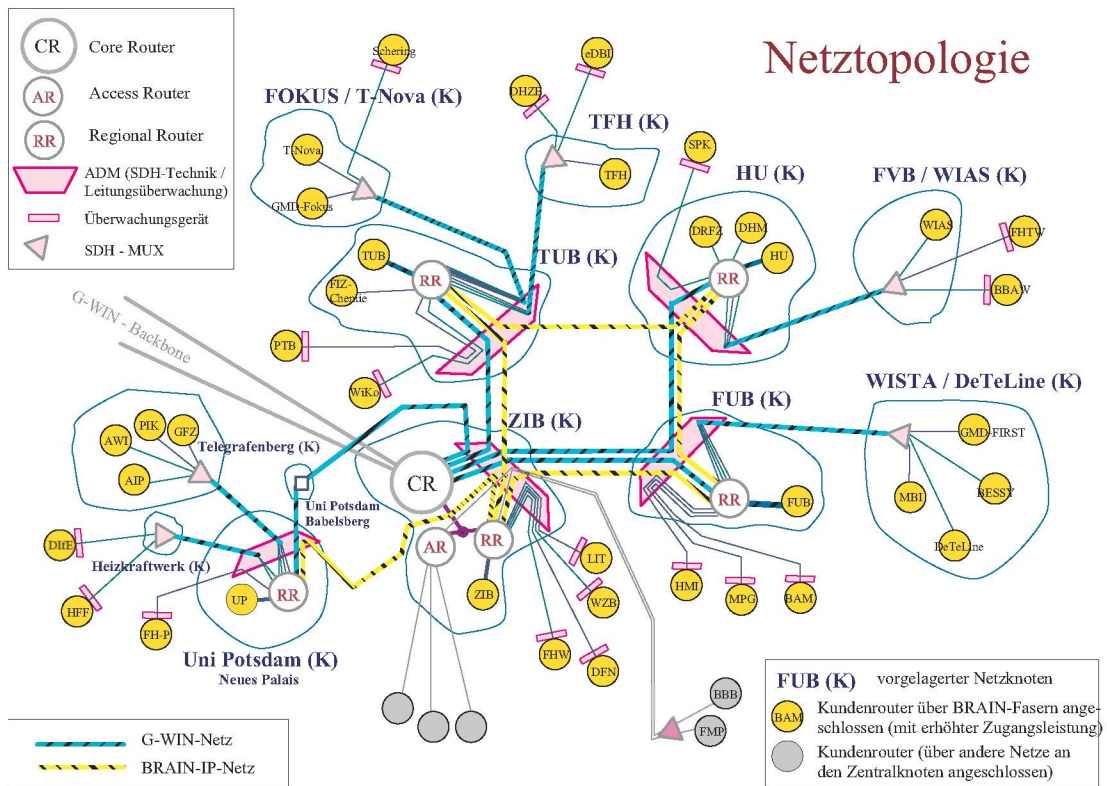


ABBILDUNG 4.9: Netztopologie für alle über BRAIN-Fasern an das G-WiN angeschlossenen Einrichtungen in Berlin und Potsdam.

orte. In diesem Sinne wird Classical BRAIN z.Zt. hauptsächlich von den Universitäten und von den großen wissenschaftlichen Gesellschaften und Verbänden (wie Fraunhofer-Gesellschaft, Max-Planck-Gesellschaft und Forschungsverbund Berlin) zur Verwaltung ihrer diversen Einrichtungen sowie zur Vernetzung von Arbeitsgruppen und Projekten aus diesen Einrichtungen genutzt. Mit der Stiftung Preußischer Kulturbesitz wird ein weiterer Teilnehmer hinzukommen, für den das regionale Netz eine ähnliche Funktion haben wird.

In technischer Hinsicht konnte das Netz „Classical BRAIN“ im vergangenen Jahr an vielen Stellen aufgerüstet und modernisiert werden. Neben der seit Jahren bewährten ATM-Technik wurde bei den neu zu installierenden Teilen des Netzes fast ausschließlich Gigabit-Ethernet-Technik eingesetzt. Schnittstellen zwischen den beiden Netzen befinden sich in der Humboldt-Universität und im ZIB.

Im ATM-Teil von BRAIN hat der FVB die Vernetzung seiner 8 Standorte so gestaltet, dass die eigene ATM-Struktur zugleich als Grundstruktur für das gesamte ATM-basierte Teilnetz zur Verfügung steht.

Die weiteren Planungen sehen vor, Classical BRAIN zu einem Autonomem System

(AS) nach den Vorgaben des europäischen RIPE Network Coordination Centre auszubauen.

4.4.4 Koordinierung der Berliner Gigabit-Testbed-Projekte

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger

Kooperationspartner: Deutsches Forschungsnetz, DFN-Verein; Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF); Deutsche Telekom AG

Die seit 1997 vom DFN-Verein im Rahmen des Gigabit-Testbed initiierten Projekte sind mittlerweile alle zum Abschluss gekommen. Als letztes Teilprojekt wurde das Projekt GigaMedia (Gigabit-Media-Dienste für Kooperative Postproduktion von Film und Video) im Oktober 2001 beendet. Damit stehen die insgesamt 104 km Doppelfaser, die aus dem LWL-Netz von BRAIN für die GTB-Projekte bereit gestellt waren, wieder für andere Projekte zur Verfügung.

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 01-01. Thorsten Hohage; Frank Schmidt; Lin Zschiedrich. *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition: Theory.*

Abstract: The pole condition is a general concept for the theoretical analysis and the numerical solution of a variety of wave propagation problems. It says that the Laplace transform of the physical solution in radial direction has no poles in the lower complex half-plane. In the present paper we show that for the Helmholtz equation with a radially symmetric potential the pole condition is equivalent to Sommerfeld's radiation condition. Moreover, a new representation formula based on the pole condition is derived and used to prove existence, uniqueness and asymptotic properties of solutions. This lays the foundations of a promising new algorithm to solve time-harmonic scattering problems numerically and provides a new approach for analyzing existing algorithms such as the Perfectly Matched Layer (PML) method and the Bayliss-Gunzburger-Turkel (BGT) algorithm.

ZIB-Report 01-02. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Andreas Löbel. *Duty Scheduling in Public Transit.*

Abstract: This article is about *adaptive column generation techniques* for the solution of duty scheduling problems in public transit. The current optimization status is exploited in an adaptive approach to guide the subroutines for duty generation, LP resolution, and schedule construction toward relevant parts of a large problem. Computational results for three European scenarios are reported.

ZIB-Report 01-03. Alexander Fischer; Christof Schütte; Peter Deuffhard; Frank Cordes. *Hierarchical Uncoupling-Coupling of Metastable Conformations.*

Abstract: Uncoupling-coupling Monte Carlo (UCMC) combines uncoupling techniques for finite Markov chains with Markov chain Monte Carlo methodology. UCMC aims at avoiding the typical metastable or trapping 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. Therefore, the state space of the chain has to be hierarchically decomposed into its metastable conformations. This is done by means of combining the technique of conformation analysis as recently introduced by the authors, and appropriate annealing strategies. We present a detailed examination of the uncoupling-coupling procedure which uncovers its theoretical background, and illustrates the hierarchical algorithmic approach. Furthermore, application of the UCMC algorithm to the n -pentane molecule allows us to discuss the effect of its crucial steps in a typical molecular scenario.

ZIB-Report 01-04. René Henrion; Pu Li; Andris Möller; Marc C. Steinbach; Moritz Wendt; Günter Wozny. *Stochastic Optimization for Operating Chemical Processes Under Uncertainty*. (Appeared in: Online Optimization of Large Scale Systems, Springer, 2001)

Abstract: Mathematical optimization techniques are on their way to becoming a standard tool in chemical process engineering. While such approaches are usually based on deterministic models, uncertainties such as external disturbances play a significant role in many real-life applications.

The present article gives an introduction to practical issues of process operation and to basic mathematical concepts required for the explicit treatment of uncertainties by stochastic optimization.

ZIB-Report 01-05. Izaskun Garrido; Marc C. Steinbach. *A Multistage Stochastic Programming Approach in Real-Time Process Control*. (Appeared in: Online Optimization of Large Scale Systems, Springer, 2001)

Abstract: Standard model predictive control for real-time operation of industrial production processes may be inefficient in the presence of substantial uncertainties. To avoid overly conservative disturbance corrections while ensuring safe operation, random influences should be taken into account explicitly.

We propose a multistage stochastic programming approach within the model predictive control framework and apply it to a distillation process with a feed tank buffering external sources. A preliminary comparison to a probabilistic constraints approach is given and first computational results for the distillation process are presented.

ZIB-Report 01-06. Chul-Young Byun. *Lower Bounds for Large-Scale Set Partitioning Problems*.

Abstract: In this work we concentrate on developing methods which determine good lower bounds for set partitioning problems (SPP) in an appropriate amount of time. We found out that it makes sense to use the Lagrangian relaxation method for this task. The Lagrangian relaxed problem of SPP has a simple structure,

which leads to algorithms and heuristics, whose total complexity per iteration depends linearly on the number of non-zeros of the problem matrix of SPP. In contrast, other methods like simplex methods or interior point methods have a complexity of higher order. Because the problem matrices of our tested instances are sparse, the linear dependence becomes an advantage for the algorithms and heuristics mentioned above.

As a reference for the state-of-the-art we have applied the dual simplex method and the barrier function method, implemented in CPLEX. The methods, which we have developed and compared with those of CPLEX, are SBM, CAM, CCBM, and CBM. SBM is a subgradient bundle method derived from the basic subgradient method, which is a global convergent method for determining the maximum of concave functions. CAM is a coordinate ascent method, where the convex coordinate bundle method CCBM and the coordinate bundle method CBM are derivatives from CAM.

We observed that the basic subgradient and the coordinate ascent method are improved if bundling techniques can be used. But the motivation for bundling differs for both approaches. In the former case bundling helps to approximate a minimum norm subgradient, which provides a steepest ascent direction, in order to speed up the performance. In the latter case bundling enables proceeding along directions, which are not restricted on the coordinate directions. By this the performance is accelerated.

Among all used techniques stabilization is worth mentioning. Stabilization improves the performance especially at the beginning by avoiding too big steps during the proceeding. This leads to a more stabilized progression. Stabilization was successfully applied to SBM, CAM, CCBM, and CBM.

As an overall result we conclude the following:

1. CPLEX computes the optimal objective values, whereas SBM and CBM has on average a gap of under 1.5%.
2. In comparison to CPLEX baropt, SBM, CAM, and CBM the algorithm CCBM has a slow convergence because of the convex combination of ascent coordinate directions. An alternative is to relax the convex combination to a simple sum of the corresponding directions. This idea is realized in CBM.
3. If we focus on the running time rather than on optimality then CBM is on average the fastest algorithm.

Note that methods like SBM or CBM are applied on static SPP instances in order to determine a good lower bound. For solving SPP we need dynamical methods. Due to the complex topic of dynamical methods we will not discuss them, but a certain technique is worth mentioning. It is called column generation. We have indicated that this technique needs good Lagrangian multipliers of the corresponding SPP instances in order to generate further columns (in our case

duties), which are added to the current SPP instance. Those multipliers are by-products of methods like our six considered methods. Due to the large number of such generation steps the running time depends on the computation time of these methods. Therefore, CBM fits more to this technique than CPLEX baropt or SBM.

To sum it up it can be said that applications such as a duty scheduling can be described as set partitioning problems, whose lower bound can be solved by simplex, interior points, subgradient, or coordinate ascent methods. It turns out that the interior points method CPLEX baropt and the heuristic CBM have good performances. Furthermore, good Lagrangian multipliers, which are by-products of these methods, can be used by techniques like column generation. For this particular technique it also turns out that among our tested algorithms CBM is the most efficient one. In general we can state that real-world applications, which have to solve a large number of Lagrangian relaxed SPP instances can improve their performance by using CBM.

ZIB–Report 01-07. Sven O. Krumke; Willem de Paepe; Jörg Rambau; Leen Stougie. *Online Bin-Coloring.*

Abstract: We introduce a new problem that was motivated by a (more complicated) problem arising in a robotized assembly environment. The *bin coloring problem* is to pack unit size colored items into bins, such that the maximum number of different colors per bin is minimized. Each bin has size $B \in \mathbb{N}$. The packing process is subject to the constraint that at any moment in time at most $q \in \mathbb{N}$ bins may be partially filled. Moreover, bins may only be closed if they are filled completely. An online algorithm must pack each item must be packed without knowledge of any future items.

We investigate the existence of competitive online algorithms for the online uniform binpacking problem. We show upper bounds for the bin coloring problem. We prove an upper bound of $3q - 1$ and a lower bound of $2q$ for the competitive ratio of a natural greedy-type algorithm, and show that surprisingly a trivial algorithm which uses only one open bin has a strictly better competitive ratio of $2q - 1$. Moreover, we show that any deterministic algorithm has a competitive ratio $\Omega(q)$ and that randomization does not improve this lower bound even when the adversary is oblivious.

ZIB–Report 01-08. Marc C. Steinbach. *Tree-Sparse Convex Programs.*

Abstract: Dynamic stochastic programs are prototypical for optimization problems with an inherent tree structure inducing characteristic sparsity patterns in the KKT systems of interior methods. We propose an integrated modeling and solution approach for such tree-sparse programs. Three closely related natural formulations are theoretically analyzed from a control-theoretic viewpoint and compared to each other. Associated KKT solution algorithms with linear complexity are developed and comparisons to other interior approaches and related problem formulations are discussed.

ZIB-Report 01-09. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On the Moments of the Overflow and Freed Carried Traffic for the GI/M/C/0 System.*

Abstract: In circuit switching networks call streams are characterized by their mean and peakedness (two-moment method). The GI/M/C/0 system is used to model a single link, where the GI-stream is determined by fitting moments appropriately. For the moments of the overflow traffic of a GI/M/C/0 system there are efficient numerical algorithms available. However, for the moments of the freed carried traffic, defined as the moments of a virtual link of infinite capacity to which the process of calls accepted by the link (carried arrival process) is virtually directed and where the virtual calls get fresh exponential i.i.d. holding times, only complex numerical algorithms are available. This is the reason why the concept of the freed carried traffic is not used rigorously. The main result of this paper is an efficient algorithm for computing the moments of the freed carried traffic, in particular an explicit formula for its peakedness. This result offers a unified handling of both overflow and carried traffics in networks. Furthermore, some refined characteristics for the overflow and freed carried streams are derived.

ZIB-Report 01-10. Monika Kuberek. *KOBV : institutionalisiert.* (Erschienen in: Bibliotheksdienst 35 (2001), Heft 9, S. 1079-1088)

Zusammenfassung: Der Aufsatz ist die ausgearbeitete Fassung eines Vortrages, gehalten am 05.04.2001 auf dem 91. Deutschen Bibliothekartag in Bielefeld. Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) ist im Rahmen eines wissenschaftlichen Projektes in den Jahren 1997 bis 2000 am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) aufgebaut worden. Nachdem das Projekt erfolgreich abgeschlossen ist, wird der KOBV 2001 institutionalisiert. In dem Vortrag hat die Verfasserin einen Überblick über das bisher Erreichte, den derzeitigen Stand und die Perspektiven des neuen Verbundes gegeben.

Der KOBV stellt eine neue Art 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. Eine kleine Verbundzentrale koordiniert dieses Geflecht vernetzter lokaler Einheiten, vertritt den KOBV nach außen und arbeitet - in Form von Projekten - an seiner Weiterentwicklung. Der Entwicklungsaspekt und die Nutzerorientierung sind zwei wesentliche Komponenten in der Verbundarbeit. Berlin und Brandenburg haben auf engem Raum zahlreiche Bibliotheken mit großen, reichhaltigen Medienbeständen. Mittel- bis langfristig sollen Bibliotheken aller Sparten und Größen in den KOBV integriert werden, seien es wissenschaftliche Universalbibliotheken, universitäre Bibliothekssysteme, Spezialbibliotheken, Behörden- und Parlamentsbibliotheken oder öffentliche Bibliothe-

ken. Auch regionale Bibliotheksverbände können als Subverbände am KOBV teilnehmen.

Mit der KOBV-Suchmaschine ist eine offene Plattform geschaffen worden, auf der weitere Entwicklungen aufsetzen können. Der Aufbau einer virtuellen Regionalbibliothek mit Bestell- und Lieferkomponenten ist eines der Ziele. Darüber hinaus ist es die Vision, in der Region ein virtuelles *Wissensportal* aufzubauen, das dem Nutzer unter einer Adresse den umfassenden Zugang und die umfassende Bereitstellung von Informationen aller Art bietet.

ZIB-Report 01-11. Alexander Reinefeld; Volker Lindenstruth. *How to Build a High-Performance Compute Cluster for the Grid.*

Abstract: The success of large-scale multi-national projects like the forthcoming analysis of the LHC particle collision data at CERN relies to a great extent on the ability to efficiently utilize computing a management software (Datagrid, Globus, etc.), while the effective integration of computing nodes has been largely neglected up to now. This is the focus of our work.

We present a framework for a high-performance cluster that can be used as a reliable computing node in the Grid. We outline the cluster architecture, the management of distributed data and the seamless intergration of the cluster into the Grid environment.

ZIB-Report 01-12. Martin Weiser; Peter Deuffhard. *The Central Path towards the Numerical Solution of Optimal Control Problems.*

Abstract: A new approach to the numerical solution of optimal control problems including control and state constraints is presented. Like hybrid methods, the approach aims at combining the advantages of direct and indirect methods. Unlike hybrid methods, however, our method is directly based on interior-point concepts in function space — realized via an adaptive multilevel scheme applied to the complementarity formulation and numerical continuation along the central path. Existence of the central path and its continuation towards the solution point is analyzed in some theoretical detail. An adaptive stepsize control with respect to the duality gap parameter is worked out in the framework of affine invariant inexact Newton methods. Finally, the performance of a first version of our new type of algorithm is documented by the successful treatment of the well-known intricate windshear problem.

ZIB-Report 01-13. Martin Grötschel. *Copyright und elektronisches Publizieren: Auf dem Weg zu vernünftigen Regelungen?* (Erschienen in: DMV-Mitteilungen Nr. 3 (2001) pp. 8-10)

Zusammenfassung: Das *Committee on Electronic Information and Communication* (CEIC) der *International Mathematical Union* (IMU) hat die Aufgabe, sich über die langfristige Informationsversorgung in der Mathematik Gedanken zu machen und Lösungsvorschläge hierfür zu erarbeiten. Das Kernthema ist natürlich „Elektronisches Publizieren“. Dazu gehören auch Copyright-Regelungen. Mit diesem Artikel beginnt eine kleine Serie von Aufsätzen, in

denen ich (in meiner Funktion als eines von elf CEIC-Mitgliedern) die Empfehlungen des CEIC erläutern werde.

ZIB-Report 01-14. Bodo Erdmann; Cornelia Kober; Jens Lang; Robert Sader; Hans-Florian Zeilhofer; Peter Deuffhard. *Efficient and Reliable Finite Element Methods for Simulation of the Human Mandible.*

Abstract: By computed tomography data (CT), the individual geometry of the mandible is quite well reproduced, also the separation between cortical and trabecular bone. Using anatomical knowledge about the architecture and the functional potential of the masticatory muscles, realistic situations were approximated.

The solution of the underlying partial differential equations describing linear elastic material behaviour is provided by an adaptive finite element method. Estimations of the discretization error, local grid refinement, and multilevel techniques guarantee the reliability and efficiency of the method.

ZIB-Report 01-15. Rainald Ehrig; O. Ofenloch; K. Schaber; Peter Deuffhard. *Modelling and Simulation of Aerosol Formation by Heterogeneous Nucleation in Gas-Liquid Contact Devices.*

Abstract: This paper describes a new simulation tool for the prediction of aerosol formation and behavior in gas-liquid contact devices such as absorbers, scrubbers, quench coolers, and condensers as well as multistage gas cleaning processes, respectively.

Aerosol formation can impact severely the separation efficiency of gas cleaning processes. Aerosol or fog formation can arise by spontaneous condensation or desublimation in supersaturated gas phases.

The rigorous description of the mass and energy transfer between the gas phase, the liquid phase, and the growing aerosol droplets leads to a system of partial differential and algebraic equations. For the solution of these systems we have developed the plant simulation tool **AerCoDe**. This program bases upon the linearly-implicit Euler discretisation, which in combination with extrapolation permits an adaptive step size and order control.

Typical simulation results of a multistage industrial flue gas scrubbing process are presented. It is shown, that experimental data can be confirmed if the number concentration of condensation nuclei as an input parameter is roughly known.

ZIB-Report 01-16. Martin Grötschel; Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Thomas Winter; Uwe T. Zimmermann. *Combinatorial Online Optimization in Real Time.* Available **only** via **anonymous-ftp** (Appeared in: *Online Optimization of Large Scale Systems*, Springer, 2001)

Abstract: Optimization is the task of finding an optimum solution to a given problem. When the decision variables are discrete we speak of a combinatorial optimization problem. Such a problem is online when decisions have to be made before all data of the problem are known. And we speak of a real-time online problem when online decisions have to be computed within very tight time

bounds. This paper surveys the area of combinatorial online and real-time optimization, it discusses, in particular, the concepts with which online and real-time algorithms can be analyzed.

ZIB-Report 01-17. Martin Grötschel; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Online Optimization of Complex Transportation Systems*. (Appeared in: *Online Optimization of Large Scale Systems*, Springer, 2001)

Abstract: This paper discusses online optimization of real-world transportation systems. We concentrate on transportation problems arising in production and manufacturing processes, in particular in company internal logistics. We describe basic techniques to design online optimization algorithms for such systems, but our main focus is decision support for the planner: which online algorithm is the most appropriate one in a particular setting? We show by means of several examples that traditional methods for the evaluation of online algorithms often do not suffice to judge the strengths and weaknesses of online algorithms. We present modifications of well-known evaluation techniques and some new methods, and we argue that the selection of an online algorithm to be employed in practice should be based on a sound combination of several theoretical and practical evaluation criteria, including simulation.

ZIB-Report 01-18. Annegret Wagler. *Rank-Perfect and Weakly Rank-Perfect Graphs*.

Abstract: An edge of a perfect graph G is critical if $G - e$ is imperfect. We would like to decide whether $G - e$ is still *almost perfect* or already *very imperfect*. Via relaxations of the stable set polytope of a graph, we define two superclasses of perfect graphs: rank-perfect and weakly rank-perfect graphs. Membership in those two classes indicates how far an imperfect graph is away from being perfect. We study the cases, when a critical edge is removed from the line graph of a bipartite graph or from the complement of such a graph.

ZIB-Report 01-19. Rolf Jeltsch; Gilbert Strang; Peter Deuffhard (Chairs). *First SIAM-EMS Conference "Applied Mathematics in our Changing World" Berlin 2001 - Collection of Abstracts*.

Abstract: Collection of abstracts of the first SIAM-EMS conference "Applied Mathematics in our Changing World" in Berlin, September 2-6, 2001.

ZIB-Report 01-20. Thorsten Koch. *ZIMPL User Guide*.

Abstract: ZIMPL is a little language to translate the mathematical model of a problem into a linear or (mixed-)integer mathematical program expressed in lp or mps file format which can be read by a LP or MIP solver.

ZIB-Report 01-21. Dagmar Otto. *Informationsportale und Digitale Bibliotheken*.

Zusammenfassung: Im ersten Teil des folgenden Aufsatzes werden allgemeine Überlegungen zur Entwicklung von Bibliotheken hin zu Informationsvermittlungsstellen für sowohl elektronische wie auch gedruckte Medien angestellt. Basierend auf den Ergebnissen der Evaluation digitaler Bibliotheken und

Informationsportale in Deutschland wird ein erster Kriterienkatalog für ein Verbund-Informationsportal für den Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg entwickelt.

Im Anhang befindet sich der Statusbericht über Informationsportale und digitale Bibliotheken in Deutschland. Dazu wurden sieben digitale Bibliotheken auf Verbundebene und 21 Bibliotheken nach Bundesländern evaluiert.

ZIB-Report 01-22. Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Luis Miguel Torres. *Real-Time Dispatching of Guided and Unguided Automobile Service Units with Soft Time Windows.*

Abstract: Given a set of service requests (events), a set of guided servers (units), and a set of unguided service contractors (conts), the vehicle dispatching problem *vdp* is the task to find an assignment of events to units and conts as well as tours for all units starting at their current positions and ending at their home positions (dispatch) such that the total cost of the dispatch is minimized.

The cost of a dispatch is the sum of unit costs, cont costs, and event costs. Unit costs consist of driving costs, service costs and overtime costs; cont costs consist of a fixed cost per service; event costs consist of late costs linear in the late time, which occur whenever the service of the event starts later than its deadline.

The program ZIBDIP based on dynamic column generation and set partitioning yields solutions on heavy-load real-world instances (215 events, 95 units) in less than a minute that are no worse than 1% from optimum on state-of-the-art personal computers.

ZIB-Report 01-23. Thorsten Hohage; Frank Schmidt; Lin Zschiedrich. *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition: Convergence of the PML method.*

Abstract: In this paper we study the PML method for Helmholtz-type scattering problems with radially symmetric potential. The PML method consists in surrounding the computational domain by a **P**erfectly **M**atched sponge **L**ayer. We prove that the approximate solution obtained by the PML method converges exponentially fast to the true solution in the computational domain as the thickness of the sponge layer tends to infinity. This is a generalization of results by Lassas and Somersalo based on boundary integral equation techniques. Here we use techniques based on the pole condition instead. This makes it possible to treat problems without an explicitly known fundamental solution.

ZIB-Report 01-24. Marc C. Steinbach. *General Information Constraints in Stochastic Programs.*

Abstract: Scenario tree models of stochastic programs arise naturally under standard nonanticipativity assumptions. We demonstrate how tree-sparse programs cover the general case, with *arbitrary* information constraints. Detailed examples and intuitive interpretations illuminate the basic thoughts behind the abstract but elementary construction.

ZIB-Report 01-25. Ralf Kähler; Mark Simon; Christian Hege. *Fast Volume Rendering of Sparse Datasets Using Adaptive Mesh Refinement.*

Abstract: In this paper we present an algorithm that accelerates 3D texture-based volume rendering of large and sparse data sets. A hierarchical data structure (known as AMR tree) consisting of nested uniform grids is employed in order to efficiently encode regions of interest. The hierarchies resulting from this kind of space partitioning yield a good balance between the amount of volume to render and the number of texture bricks – a prerequisite for fast rendering. Comparing our approach to an octree based algorithm we show that our algorithm increases rendering performance significantly for sparse data. A further advantage is that less parameter tuning is necessary.

ZIB-Report 01-26. Christoph Helmberg. *A Cutting Plane Algorithm for Large Scale Semidefinite Relaxations.*

Abstract: The recent spectral bundle method allows to compute, within reasonable time, approximate dual solutions of large scale semidefinite quadratic 0-1 programming relaxations. We show that it also generates a sequence of primal approximations that converge to a primal optimal solution. Separating with respect to these approximations gives rise to a cutting plane algorithm that converges to the optimal solution under reasonable assumptions on the separation oracle and the feasible set. We have implemented a practical variant of the cutting plane algorithm for improving semidefinite relaxations of constrained quadratic 0-1 programming problems by odd-cycle inequalities. We also consider separating odd-cycle inequalities with respect to a larger support than given by the cost matrix and present a heuristic for selecting this support. Our preliminary computational results for max-cut instances on toroidal grid graphs and balanced bisection instances indicate that warm start is highly efficient and that enlarging the support may sometimes improve the quality of relaxations considerably.

ZIB-Report 01-27. Martin Grötschel. *Telota - was soll das?*. (Erschienen in: Circular der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften (BBAW), 23/5., Dez 2001, 3-7)

Zusammenfassung: Telota ist ein Kunstwort, das für alle Aktivitäten der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften steht, die der Förderung von Forschung, Kommunikation und Präsentation durch elektronische Medien dienen. In diesem Artikel werden die Entstehung des Telota-Projektes geschildert und die Ziele diskutiert, die mit diesem Projekt erreicht werden sollen. Es geht darum, moderne Informationstechnik bewusst, geplant und nachhaltig für alle Belange der BBAW einzusetzen.

Informationstechnische Werkzeuge sollen für die wissenschaftliche Arbeit effizient genutzt werden; die Information nach innen und nach außen soll deutlich verbessert werden; eine bessere Kommunikationsinfrastruktur soll die Zusammenarbeit fördern.

ZIB-Report 01-28. Martin Grötschel. *Empfehlungen des Wissenschaftsrates zur digitalen Informationsversorgung durch Hochschulbibliotheken*. (Erschienen in: DMV-Mitteilungen Nr. 4/2001, S. 40-43)

Zusammenfassung: Der Wissenschaftsrat hat in seiner Juli-Sitzung 2001 „Empfehlungen zur digitalen Informationsversorgung durch Hochschulbibliotheken“ verabschiedet. Einige der Vorschläge des Wissenschaftsrates können, falls sie von den angesprochenen Institutionen aufgenommen werden, zu einer nachhaltigen Veränderung der wissenschaftlichen Informationslandschaft führen.

In meinem kurzen Kommentar zu diesem Papier möchte ich auf einige dieser Anregungen hinweisen.

ZIB-Report 01-29. Martin Grötschel. *Mein digitaler Traum*. (Erschienen in: Gegenworte, Zeitschrift für den Disput über Wissen, herausg. von der BBAW, 8. Herbst 2001, 10-16)

Zusammenfassung: Von welcher „Informationsumwelt“ träumt jemand, der für seine wissenschaftliche (und sonstige) Arbeit digitale Informationstechnologie intensiv einsetzt? In diesem Artikel beschreibe ich meinen „digitalen Traum“. Er ist ganz einfach zu formulieren: „**Ich will alles und zwar sofort, jederzeit, überall und kostenlos zur Verfügung haben**“. Ich schildere, was davon heute schon (fast) realisiert ist und was noch fehlt.

Ich skizziere einige zentrale Schwierigkeiten der vollständigen Realisierung und skizziere mögliche Lösungen.

ZIB-Report 01-30. Ralf Kähler; Hans-Christian Hege. *Interactive Volume Rendering of Adaptive Mesh Refinement Data*.

Abstract: Many phenomena in nature and engineering happen simultaneously on rather diverse spatial and temporal scales, i.e. exhibit a multi-scale character. Therefore various hierarchical data structures and numerical schemes have been devised to represent quantitatively such phenomena. A special numerical multilevel technique, associated with a particular hierarchical data structure, is so-called Adaptive Mesh Refinement (AMR). This scheme achieves locally very high spatial and temporal resolutions. Due to its popularity, many scientists are in need of interactive visualization tools for AMR data.

In this article we present a 3D texture-based volume rendering algorithm for AMR data, that directly utilizes the hierarchical structure. Thereby interactive rendering even for large data sets is achieved. In particular the problems of interpolation artifacts, opacity corrections, and texture memory limitations are addressed.

The algorithm's value in practice is demonstrated with simulation and image data.

ZIB-Report 01-31. Cornelia Kober; Robert Sader; Hans-Florian Zeilhofer; Steffen Prohaska; Stefan Zachow; Peter Deuffhard. *Anisotrope Materialmodellierung für den menschlichen Unterkiefer*.

Zusammenfassung: Im Rahmen der biomechanischen Simulation knöcherner Organe ist die Frage nach einer befriedigenden Materialbeschreibung nach wie vor ungelöst. Computertomographische Datensätze liefern eine räumliche Verteilung der (Röntgen-)Dichte und ermöglichen damit eine gute Darstellung der individuellen Geometrie. Weiter können die verschiedenen Materialbestandteile des Knochens, Spongiosa und Kortikalis, voneinander getrennt werden. Aber die richtungsabhängige Information der Materialanisotropie ist verloren.

In dieser Arbeit wird ein Ansatz für eine anisotrope Materialbeschreibung vorgestellt, die es ermöglicht, den Einfluss der individuellen knöchernen Struktur auf das makroskopische Materialverhalten abzuschätzen.

ZIB-Report 01-32. Malte Zöckler; Karlheinz Rein; Robert Brandt; Detlev Stalling Hans-Christian Hege. *Creating Virtual Insect Brains with Amira.*

Abstract: By combining techniques of preparation, histology, confocal microscopy, data visualization and data processing, we have created and recently published a standard brain model for drosophila and honey bee brains.

This report describes the algorithms and implementation of the corresponding software modules. At the same time it serves as a user's guide for scientist who want to reproduce the results for different species or mutants.

ZIB-Report 01-33. Ernst-Michael Ilgenfritz; Werner Kerler; Michael Müller-Preussker; Hinnerk Stüben. *Parallel tempering in full QCD with Wilson fermions.*

Abstract: We study the performance of QCD simulations with dynamical Wilson fermions by combining the Hybrid Monte Carlo algorithm with parallel tempering on 10^4 and 12^4 lattices. The comparison with standard simulations is based on the covariance matrices of the average plaquette and the topological charge.

ZIB-Report 01-34. Vladimir V. Sokolov; Thomas Wolf. *Classification of integrable polynomial vector evolution equations.*

Abstract: Several classes of systems of evolution equations with one or two vector unknowns are considered. We investigate also systems with one vector and one scalar unknown. For these classes all equations having the simplest higher symmetry are listed.

ZIB-Report 01-35. Andreas Brandt; Manfred Brandt. *Individual Overflow and Freed Carried Traffics for a Link with Trunk Reservation.*

Abstract: Two traffic streams Φ_1, Φ_2 are offered a link. The calls of Φ_i require exponential holding times with parameter μ and are accepted if less than C_i trunks are occupied. Approximating the Φ_i by appropriate renewal processes meeting their first two moments, defined as the moments of the numbers of calls in virtual links of infinite capacity to which the traffic streams as freed traffics are virtually directed and where the calls get fresh exponential i.i.d. holding times with parameter μ , stable recursive algorithms of complexity $O(\max(C_1, C_2))$ are

derived for the first two defined as above moments of the individual overflow and freed carried traffics. The results offer a unified handling of both overflow and carried traffics in circuit switching networks with trunk reservation, providing a basis for new two-moment network dimensioning algorithms.

ZIB-Report 01-36. Monika Kuberek. *Der KOBV - eine regionale Service-Einrichtung für Nutzer und Bibliothekare.*

Zusammenfassung: Dem vorliegenden Aufsatz liegt ein Vortrag zugrunde, den die Verfasserin auf der Ersten Gemeinsamen Fachtagung der DBV-Landesverbände Berlin und Brandenburg "Wir machen den Weg frei : Fusionen - Kooperationen in Berlin und Brandenburg" am 17. Oktober 2001 gehalten hat, in der Vortragsreihe Möglichkeiten und Grenzen von Ausleih- und bibliographischen Verbänden - VÖB Berlin, VÖB Brandenburg, KOBV".

Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) ist angetreten, um auf der Basis neuer Technologien zeitgemäße, nutzerorientierte Dienstleistungen für den Informationsbereich zu entwickeln und die Informationsinfrastruktur in der Region Berlin-Brandenburg neu zu organisieren. Dabei setzt der KOBV insbesondere auf das Internet. Die Verfasserin beschreibt die einzelnen Stufen, in denen die Dienste des KOBV aufgebaut wurden und kontinuierlich weiter ausgebaut werden. Dabei zeigt sie Vorteile auf, die Nutzern und Bibliotheken durch den Verbund entstehen, und lotet gleichzeitig die Grenzen aus, die dem Verbund gesetzt sind.

ZIB-Report 01-37. Christoph Helmberg. *Numerical Evaluation of SBmethod.*

Abstract: We report numerical results for SBmethod — a publically available implementation of the spectral bundle method — applied to the 7th DIMACS challenge test sets that are semidefinite relaxations of combinatorial optimization problems. The performance of the code is heavily influenced by parameters that control bundle update and eigenvalue computation. Unfortunately, no mathematically sound guidelines for setting them are known. Based on our experience with SBmethod, we propose heuristics for dynamically updating the parameters as well as a heuristic for improving the starting point. These are now the default settings of SBmethod Version 1.1. We compare their performance on the DIMACS instances to our previous best choices for Version 1.0. SBmethod Version 1.1 is also part of the independent DIMACS benchmark by H. Mittelmann. Based on these results we try to analyze strengths and weaknesses of our approach in comparison to other codes for large scale semidefinite programming.

ZIB-Report 01-38. Arie M.C.A. Koster; Hans L. Bodlaender; Stan P.M. van Hoesel. *Treewidth: Computational Experiments.*

Abstract: Many NP-hard graph problems can be solved in polynomial time for graphs with bounded treewidth. Equivalent results are known for pathwidth and branchwidth. In recent years, several studies have shown that this result is not only of theoretical interest but can successfully be applied to find (almost) optimal solutions or lower bounds for diverse optimization problems.

To apply a tree decomposition approach, the treewidth of the graph has to be determined, independently of the application at hand. Although for fixed k , linear time algorithms exist to solve the decision problem “treewidth $\leq k$ ”, their practical use is very limited. The computational tractability of treewidth has been rarely studied so far. In this paper, we compare four heuristics and two lower bounds for instances from applications such as the frequency assignment problem and the vertex coloring problem.

Three of the heuristics are based on well-known algorithms to recognize triangulated graphs. The fourth heuristic recursively improves a tree decomposition by the computation of minimal separating vertex sets in subgraphs. Lower bounds can be computed from maximal cliques and the minimum degree of induced subgraphs. A computational analysis shows that the treewidth of several graphs can be identified by these methods. For other graphs, however, more sophisticated techniques are necessary.

ZIB–Report 01-39. Hans L. Bodlaender; Arie M.C.A. Koster; Frank van den Eijkhof; Linda C. van der Gaag. *Pre-processing for Triangulation of Probabilistic Networks*. (Appeared in: Proceedings of the 17th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, J. Breese and D. Koller Eds., (2001), pp. 32-39, Published by Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco)

Abstract: The currently most efficient algorithm for inference with a probabilistic network builds upon a triangulation of a network’s graph. In this paper, we show that pre-processing can help in finding good triangulations for probabilistic networks, that is, triangulations with a minimal maximum clique size. We provide a set of rules for stepwise reducing a graph, without losing optimality. This reduction allows us to solve the triangulation problem on a smaller graph. From the smaller graph’s triangulation, a triangulation of the original graph is obtained by reversing the reduction steps. Our experimental results show that the graphs of some well-known real-life probabilistic networks can be triangulated optimally just by preprocessing; for other networks, huge reductions in their graph’s size are obtained.

ZIB–Report 01-40. Karen I. Aardal; Stan P.M. van Hoesel; Arie M.C.A. Koster; Carlo Mannino; Antonio Sassano. *Models and Solution Techniques for Frequency Assignment Problems*.

Abstract: Wireless communication is used in many different situations such as mobile telephony, radio and TV broadcasting, satellite communication, and military operations. In each of these situations a frequency assignment problem arises with application specific characteristics. Researchers have developed different modelling ideas for each of the features of the problem, such as the handling of interference among radio signals, the availability of frequencies, and the optimization criterion.

This survey gives an overview of the models and methods that the literature provides on the topic. We present a broad description of the practical settings in

which frequency assignment is applied. We also present a classification of the different models and formulations described in the literature, such that the common features of the models are emphasized. The solution methods are divided in two parts. Optimization and lower bounding techniques on the one hand, and heuristic search techniques on the other hand. The literature is classified according to the used methods. Again, we emphasize the common features, used in the different papers. The quality of the solution methods is compared, whenever possible, on publicly available benchmark instances.

Keywords: frequency assignment

MSC: 90-02, 90C35, 05C90

ZIB-Report 01-41. Monika Kuberek; Monika Lill; Stefan Litsche; Stefan Lohrum; Joachim Lügger; Beate Rusch; Dagmar Otto. *Entwicklungsprojekt "KOBV-Informationsportal" : Teilprojekte der 1. Stufe.*

Zusammenfassung: Die KOBV-Suchmaschine hat seit ihrer Inbetriebnahme Ende 1999 entscheidend zur Verbesserung der Informationsinfrastruktur in Berlin und Brandenburg beigetragen.

Auf der Basis der offenen Plattform KOBV-Suchmaschine wird die KOBV-Zentrale gemeinsam mit den Bibliotheken in den nächsten Jahren das Dienstleistungsangebot des KOBV und seiner Bibliotheken kontinuierlich erweitern. Dabei sollen die Prinzipien des KOBV - Offenheit, Heterogenität und Dezentralität auf technischer und organisatorischer Ebene - gewahrt bleiben.

Die einzelnen KOBV-Bibliotheken werden sich mit ihren Angeboten in unterschiedlicher Weise im Web positionieren. Die Integration auf regionaler Ebene kann und soll die lokalen Angebote nicht künstlich vereinheitlichen. Das kooperative Portal, das in der Region aufgebaut wird, ist als System geplant, in dem zentrales Portal und lokale Portale nicht hierarchisch einander zugeordnet, sondern miteinander vernetzt sind.

Das "KOBV-Informationsportal" soll in der KOBV-Zentrale im Rahmen eines wissenschaftlichen Projektes von Mitte 2001 bis Ende 2003 aufgebaut werden. Das vorliegende Papier gibt einen ersten allgemeinen Einblick, welche Funktionen das "KOBV-Informationsportal" umfassen soll und stellt die Teilprojekte der 1. Stufe vor.

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

- Computational and Applied Mathematics
- Computing
- Mathematical Methods of Operations Research
- Mathematical Programming A
- Mathematics of Operations Research
- Networks
- 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 und Tagungsbänden

1. G. Allen, W. Benger, T. Dramlitsch, T. Goodale, H.-C. Hege, G. Lanfermann, A. Merzky, T. Radke, E. Seidel, *Cactus Grid Computing: Review of Current Development*, In: R. Sakellariou, J. Keane, J. Gurd, L. Freeman (Eds.): Euro-Par 2001: Parallel Processing, Springer-Verlag, 2001, LNCS 2150, pp. 817-824
2. G. Allen, W. Benger, T. Dramlitsch, T. Goodale, H.-C. Hege, G. Lanfermann, A. Merzky, T. Radke, E. Seidel, J. Shalf, *Cactus Tools for Grid Applications*. Cluster Computing 4(3), 2001, pp. 179-188
3. N. Ascheuer, M. Fischetti und M. Grötschel, *Solving the Asymmetric Travelling Salesman Problem with time windows by branch-and-cut*, Mathematical Programming, Series A, **90** (2001), Nr. 3, 475–506.
4. M. Blom, S. O. Krumke, W. E. de Paepe und L. Stougie, *The online-TSP against fair adversaries*, Informs Journal on Computing **13** (2001), Nr. 2, 138–148.
5. H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster, F. van den Eijkhof und L. C. van der Gaag, *Pre-processing for triangulation of probabilistic networks*, Proceedings of the 17th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (San Francisco) (J. Breese und D. Koller, Hrsg.), Morgan Kaufmann Publishers, 2001, 32–39.

6. S. Booth, M. Göckeler, R. Horsley, A.C. Irving, B. Joo, S. Pickles, D. Pleiter, P.E.L. Rakow, G. Schierholz, Z. Sroczynski, H. Stüben, *Determination of $\Lambda_{\overline{MS}}$ from quenched and $N_f = 2$ dynamical QCD*, Phys. Lett. B519 (2001), 229–237.
7. R. Borndörfer und R. Weismantel, *Discrete relaxations of combinatorial programs*, Discrete Applied Mathematics **112** (2001), Nr. 1–3, 11–26.
8. M. Brandl, M. Meyer, J. Sühnel, *Quantum-Chemical Analysis of C-H...O and N-H...O Interactions in RNA Base Pairs*, J. Biomol. Struct. Dyn. **18** (2001), 545.
9. A. Brandt und M. Brandt, *Approximation for overflow moments of a multiservice link with trunk reservation*, Performance Evaluation **43** (2001), 259–268.
10. Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *A density functional study of small $(AlN)_x$ clusters: structures, energies, and frequencies*, Chem. Phys. **271** (2001), 283–292.
11. Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, T. Steinke, D. Sülzle, *Computational evidence for stable inorganic fullerene-like structures of ceramic and semiconductor materials*, Chem. Phys. Lett. **350** (2001), 399–404.
12. A. Eisenblätter (Hrsg.), *Channel allocation strategies*, in: L. Correia (Hrsg.) *Wireless Flexible Personalised Communications*. John Wiley & Sons, 2001.
13. Hans-Hermann Frese, Harald Knipp, and Detlef Reichardt, *Evaluation of C++ compilers for the Cray T3E*, CUG SUMMIT 2001 Proceedings: A Space Odyssey, 43rd CUG Conference, May 21–25, 2001, Indian Wells, CA, USA, Cray User Group, Inc., 2001.
14. S. Fuhrmann, S. O. Krumke und H.-C. Wirth, *Multiple hotlink assignment*, Proceedings of the 27th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2204, Springer, 2001, 189–200.
15. I. Garrido und M. C. Steinbach, *A Multistage Stochastic Programming Approach in Real-Time Process Control*, Online Optimization of Large Scale Systems (M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, Hrsg.), Springer, 2001, S. 479–498.
16. K. Gatermann, *Counting stable solutions of sparse polynomial systems in chemistry*, Solving Polynomial Systems, Contemporary Mathematics Volume 286 (2001).
17. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *Validation of a Linear Elastic Model for Soft Tissue Prediction in Craniofacial Surgery*, SPIE Medical Imaging, San Diego, USA, 2001, pp. 27–35
18. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *Validierung eines linearen elastischen Modells für die Weichgewebesimulation in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie*, Bildverarbeitung für die Medizin (BVM), Lübeck, Germany, 2001, pp. 57–61.

19. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *A Biomechanical Model for Soft Tissue Simulation in Craniofacial Surgery*, Medical Imaging and Augmented Reality (MIAR), Hong Kong, China, 2001, pp. 137–141
20. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *Virtual Fibers: A Robust Approach for Muscle Simulation*, IX. Mediterranean Conference on Medical and Biological Engineering and Computing (MEDICON), Pula, Croatia, 2001, pp. 961–964
21. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *FE-based heuristic approach for the estimation of person-specific facial mimics*, 5-th Int. Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, Rome, Italy, 2001
22. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege, *Towards a Realistic Simulation of Individual Facial Mimics*, Proc. Vision, Modeling and Visualisation (VMV), Stuttgart, Germany, 2001, pp. 129–133
23. M. Grötschel, *Copyright und elektronisches Publizieren: Auf dem Weg zu vernünftigen Regelungen?* DMV-Mitteilungen, **3** (2001), 8–10.
24. M. Grötschel, *Empfehlungen des Wissenschaftsrates zur digitalen Informationsversorgung durch Hochschulbibliotheken*, DMV-Mitteilungen, **4** (2001), 40–43.
25. M. Grötschel, *Mathematik in der Industrie: interessante Branchen und zukünftige Einsatzfelder*, in Berufs- und Karriere-Planer, Mathematik 2001, Schlüsselqualifikation für Technik, Wirtschaft und IT, S. 43–48. Vieweg, Januar 2001.
26. M. Grötschel, *Mein digitaler Traum*, Gegenworte der BBAW, 8. Heft, 10–16, 2001.
27. M. Grötschel, *Telota*, Circular der BBAW, Nr. 23, 3–7, 2001.
28. M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Online Optimization of Complex Transportation Systems*, in M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau (Hrsg.), *Online Optimization of Large Scale Systems*, Springer, September 2001.
29. M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau, T. Winter und U. T. Zimmermann, *Combinatorial Online Optimization in Real Time*, in M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau (Hrsg.), *Online Optimization of Large Scale Systems*. Springer, September 2001.
30. M. Grötschel, M. Kuberek, M. Lill, S. Lohrum, J. Lügger und B. Rusch, *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*, Bibliothek, Forschung und Praxis, **25** (2001), Nr. 1, 55–65.
31. M. Grötschel und M. W. Padberg, *The Optimized Odyssey*, AIROnews, **VI** (2001), Nr. 2, 1–7.
32. M. Grötschel, M. W. Padberg, *Le stanze del TSP*, AIROnews, **VI** (2001), Nr. 3, 6–9.

33. D. Hauptmeier, S. O. Krumke, J. Rambau und H.-C. Wirth, *Euler is standing in line*, Discrete Applied Mathematics **113** (2001), 87–107.
34. K. Helmes, S. Röhl und R. Stockbridge, *Computing Moments of the Exit Time Distribution for Markov Processes by Linear Programming*, Operations Research **49** (2001), Nr. 4, 516–530.
35. R. Henrion, P. Li, A. Möller, M. C. Steinbach, M. Wendt und G. Wozny, *Stochastic Optimization for Operating Chemical Processes Under Uncertainty*, Online Optimization of Large Scale Systems (M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, Hrsg.), Springer, 2001, S. 457–478.
36. H. F. Hoffmann, A. Putzer, A. Reinefeld, *Vom World Wide Web zum World Wide Grid - Eine neue Informations-Infrastruktur für wissenschaftliche Anwendungen*, Physikalische Blätter 57 (2001) Nr. 12, pp. 39-44.
37. A. Keller, A. Reinefeld, *Anatomy of a Resource Management System for HPC-Clusters*, In: Yuen Chung Kwong (ed.), Annual Review of Scalable Computing, Vol. 3, Singapore University Press, ISBN 981-02-4579-3, 2001, pp. 1-31.
38. T. Koch, A. Martin und S. Voß, *SteinLib: An Updated Library on Steiner Tree Problems in Graphs*, in D.-Z. Du, X. Cheng (Hrsg.): Steiner Trees in Industries, **285–325**, Kluwer, 2001.
39. T. Köhler, P. Maass, P. Wust, M. Seebass, *A fast algorithm to find optimal controls of multiantenna applicators in regional hyperthermia*, Phys. Med. Biol., vol. 46, 2001, pp. 2503-2514.
40. G. Konjevod, S. O. Krumke und M. V. Marathe, *Budget constrained minimum cost connected medians*, Journal of Discrete Algorithms (2001).
41. A. M. C. A. Koster, H. L. Bodlaender und C. P. M. van Hoesel, *Treewidth: Computational Experiments*, Electronic Notes in Discrete Mathematics (H. Broersma, U. Faigle, J. Hurink, und S. Pickl, Hrsg.), Bd. 8, Elsevier Science Publishers, 2001, Elektronisch erhältlich unter <http://www.elsevier.nl/gej-ng/31/29/24/41/23/show/Products/notes/index.htm>
42. A. M. C. A. Koster, C. P. M. van Hoesel und A. W. J. Kolen, *Lower bounds for Minimum Interference Frequency Assignment Problems*, Ricerca Operativa **30** (2000, erst 2001 erschienen), Nr. 94–95, 101–116.
43. S. O. Krumke, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *News from the online traveling repairman*, Proceedings of the 26th International Symposium on Mathematical Foundations of Computer Science, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2136, 2001, 487–499.
44. S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bincoloring*, Proceedings of the 9th Annual European Symposium on Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, 74–84.

45. S. O. Krumke, M. V. Marathe, H. Noltemeier, S. S. Ravi und H.-C. Wirth, *Upgrading bottleneck constrained forests*, Discrete Applied Mathematics **108** (2001), Nr. 1–2, 129–142.
46. S. O. Krumke, M. V. Marathe und S. S. Ravi, *Models and approximation algorithms for channel assignment in radio networks*, Wireless Networks **7** (2001), Nr. 6, 575–584.
47. M. Kuberek *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) - Konzept, Erfahrungen, Ausblick*, in: BSZ-Kolloquium am 09. und 10. Oktober 2000 an der Universität Konstanz: Vorträge, Bibliotheksservice-Zentrum Baden-Württemberg, Konstanz 2001, 109–119
48. M. Kuberek *KOBV: institutionalisiert*. Vortrag auf dem 91. Deutschen Bibliothekartag 02. bis 05. April 2001 in Bielefeld. Textfassung: April 2001, in: Bibliotheksdienst **35** (2001), Heft 9, 1079–1088
49. J. Lang, J. Verwer, *ROS3P — An Accurate Third-Order Rosenbrock Solver Designed for Parabolic Problems*, BIT **41**, 730–737 (2001)
50. J. Lang, B. Erdmann, *Adaptive Linearly Implicit Methods for Heat and Mass Transfer Problems*, in: A.V. Wouwer, P. Saucez, W.E. Schiesser (eds.), Adaptive Methods of Lines, 295–316, CRC Press (2001)
51. J. Lang, B. Erdmann, *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*, in: G. de Vahl Davis and E. Leonardi (eds.), CHT'01: Advances in Computational Heat Transfer, 1001–1008, Begell House Inc., New York (2001)
52. F. H. Lutz, *Some results related to the evasiveness conjecture*, J. Comb. Theory, Ser. B **81** (2001), 110–124.
53. W. Merz, J. Lang, *Analysis and Simulation of Two-Dimensional Dopant Diffusion in Silicon*, in: K.-H. Hoffmann (ed.), Smart Materials, Proceedings of the First Caesarium, Springer-Verlag (2001).
54. M. Meyer, R. Schnurre, R. Reissbrodt, W. Trowitzsch-Kienast, *Computer-aided design of novel siderophores*, Pyridinochelin. Z. Naturforsch. **C 56**, (2001), 540.
55. M. Meyer, T. Steinke, M. Brandl, J. Sühnel, *Density functional study of guanine and uracil quartets and of guanine/metal ion complexes*, J. Comput. Chem. **22** (2001), 109.
56. M. Meyer, R. Schnurre, R. Reissbrodt, W. Trowitzsch-Kienast, *Active Analog Modelling of Siderophores*, in: Rational Approaches to Drug Design (Ed. H. D. Holtje, W. Sippl), Prous Science, Barcelona, (2001), 74.
57. M. Müller-Hannemann, C. Kober, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Anisotropic Validation of Hexahedral Meshes for Composite Materials in Biomechanics*, Proceedings of the 10th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, Newport Beach, California (2001), 249–260.

58. A. Reinefeld, *Parallel Heuristic Search and Heuristic Search*, In: C.A. Floudas, P.M. Pardalos (eds.), *Encyclopedia of Optimization*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, NL, ISBN 0-7923-6932-7, August 2001.
59. A. Reinefeld, V. Lindenstruth, *How to Build a High-Performance Compute Cluster for the Grid*, International Workshop on Metacomputing Systems and Applications MSA'2001, IEEE Computer Society Press, pp. 221-227.
60. F. Schintke, J. Simon, A. Reinefeld, *A Cache Simulator for Shared Memory Systems*, International Conference on Computational Science ICCS 2001, San Francisco, CA, Springer LNCS 2074, vol. 2, pp. 569-578.
61. F. Schmidt, T. Friese und D. Yevick, *Transparent boundary conditions for split-step Padé approximations of the one-way Helmholtz equation*, *J. Comp. Phys* **170** (2001), 696–719.
62. J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum, H.-C. Hege, *Visually stunning – molecular conformations*, *The Biochemist*, Vol. 23(5), 2001, pp. 22-26
63. M. Seebass, R. Beck, J. Gellermann, J. Nadobny, P. Wust, *Electromagnetic phased arrays for regional hyperthermia: optimal frequency and antenna arrangement*, *Int. J. Hyperthermia*, vol. 17, 2001, pp. 321-336.
64. W. Sperber *Math-Net Page Maker - a Math-Net Tool*, in: Proceedings of the Conference “Electronic Media in Mathematics”, Coimbra, Portugal.
65. W. Sperber, R. Schwänzl *Mathematical Knowledge Management and Math-Net: Semantics, Visualization and Internationalization of Math-Net*, in: Proceedings of the Conference “Mathematical Knowledge Management”, Schloss Hardenberg, 2001.
66. M. C. Steinbach, *Hierarchical Sparsity in Multistage Convex Stochastic Programs*, *Stochastic Optimization: Algorithms and Applications* (S. P. Uryasev und P. M. Pardalos, Hrsg.), Kluwer Academic Publishers, 2001, S. 385–410.
67. ———, *Markowitz Revisited: Mean-Variance Models in Financial Portfolio Analysis*, *SIAM Review* **43** (2001), Nr. 1, 31–85.
68. H. Stockinger, O. Rana, R. Moore, A. Merzky, *Data Management for Grid Environments*, Proceedings of HPCN Europe 2001: 9th International Conference on High-Performance Computing and Networking, Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2001, Vol 2110, pp. 151–160
69. H. Stüben for the QCDSF-UKQCD Collaboration, *Hadron masses from dynamical, non-perturbatively $O(a)$ improved Wilson fermions*, *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* 94 (2001), 273–276.
70. Z. Tuza und A. Wagler, *Minimally Non-Preperfect Graphs of Small Maximum Degree*, *Graphs and Combinatorics* **17** (2001) 759–773.

71. A. Wagler, *Critical and anticritical edges in perfect graphs*, Proceedings of the 27th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science (Boltenhagen), Lecture Notes in Computer Science **2204**, Springer (2001), 317-327.
72. P. Wust, H. Föhling, W. Wlodarczyk, M. Seebass, J. Gellermann, P. Deuffhard, J. Nadobny, *Antenna arrays in the SIGMA-eye applicator: Interactions and transforming networks*, Medical Physics, vol. 28, 2001, pp. 1793-1805.
73. D. Yevick, T. Friese, and F. Schmidt, *A Comparison of Transparent Boundary Conditions for the Fresnel Equation*, J. Comput. Phys. **168** (2001), 433–444.
74. S. Zachow, E. Gladilin, H.-F. Zeilhofer, R. Sader, *3D Osteotomieplanung in der MKG-Chirurgie unter Berücksichtigung der räumlichen Weichgewebeanordnung*, Lecture Notes in Informatics, Rechner- und sensorgestützte Chirurgie, GI Proc. zur SFB 414 Tagung, Heidelberg, Germany, 2001, pp. 217–226
75. S. Zachow, E. Gladilin, H.-F. Zeilhofer, R. Sader, *Improved 3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery*, Springer Lecture Notes in Computer Science, Proc. Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI), Utrecht, The Netherlands, 2001, pp. 473–481

5.4 Monographien

1. A. Eisenblätter, *Frequency Assignment in GSM Networks: Models, Heuristics, and Lower Bounds*, Cuvillier Verlag, Göttingen, Dissertation, TU Berlin, 2001.
2. M. Grötschel, S.O. Krumke und J. Rambau (Hrsg.), *Online Optimization of Large Scale Systems*, Springer, September 2001.
3. P. Deuffhard, F. Bornemann, *Numerische Mathematik II, Gewöhnliche Differentialgleichungen*, 2. vollständig überarbeitete und erweiterte Auflage, Walter de Gruyter, Berlin 2002

5.5 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Martin Weiser (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Function Space Complementarity Methods for Optimal Control Problems

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Andreas Eisenblätter (Abt. Optimierung)

Frequency Assignment in GSM Networks: Models, Heuristics, and Lower

Bounds

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.6 Diplomarbeiten

Freie Universität Berlin

Britta Broser (Abt. Numerik)

Zeitreihenanalyse und Chaos

Betreuer: Karin Gatermann (FU Berlin und ZIB)

Oliver Sander (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Constructing Boundary and Interface Parametrizations for Finite Element Solvers

Betreuer: Stefan Felsner, Hans-Christian Hege (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Chul-Young Byun (Abt. Optimierung)

Lower Bounds for Large-Scale Set Partitioning Problems

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Anke Höft (Abt. Optimierung)

Online-Optimierung einer halbautomatischen Glückwunschkarten-Kommissionierungs-Anlage

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Ronald Müller (Abt. Optimierung)

Rotationsoptimierung mit Wartungsbedingungen im Luftverkehr

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Peide Wang (Abt. Optimierung)

Integrierte Planung ausfallsicherer Kommunikationsnetze mit Link Restoration

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Saska Wensierski (Abt. Optimierung)

Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr: ein Überblick und eine Studie der holländischen Bahn

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Michel Armand Adjibi (Computer Science Research)

Scheduled Transfer Protocol and Network Systems for High-Performance Linux Clustering

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Liviu Marius Coconu (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Semi-automatic Segmentation of Bronchoscopic Images

Betreuer: Valentin Cristea, Detlev Stalling (Politehnica University of Bucharest und ZIB)

George Din (Computer Science Research)

Service Description in UNICORE

Betreuer: Valentin Cristea, Alexander Reinefeld, Hinnerk Stüben (Politehnica University of Bucharest und ZIB)

Niklas Hahn (Computer Science Research)

Effiziente dynamische Verwaltung von gemeinsam genutztem Speicher in einem verteilten System

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB) (Zweitbetreuung)

Valentin-Florian Zaharescu (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Semi-automatic Volume Slices Alignment for 3D Reconstruction and Analysis

Betreuer: Valentin Cristea, Detlev Stalling (Politehnica University of Bucharest 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/codelib>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

6.2 Amira

AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Gemetrie-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 vom ZIB SpinOff Indeed - Visual Concepts GmbH entwickelt und kommerziell angeboten. Dabei werden die Betriebssysteme IRIX, SUN Solaris, HP-UX, Linux und Windows 9x/NT4/2000 unterstützt. Die derzeit aktuelle Version ist AMIRA 2.3, welches im August 2001 released wurde. Eine Erweiterung zur Visualisierung molekularer Strukturen und zur visuellen Konformationsanalyse wird seit 2001 unter dem Namen AMIRAMOL angeboten. Module zur Entfaltung von Mikroskopbildern (AMIRADECONV) und zum Visualisieren in Virtual-Reality-Umgebungen (AMIRAVR) sind in der Entwicklung und werden voraussichtlich im ersten Quartal 2002 verfügbar sein.

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 voranzuplanen. *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, zu 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 Sokrobohatyj (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 be-

rechnete 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 (<http://www.zib.de/weiser/vtl/>).

Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

6.7 Verfahren aus der Computeralgebra

A REDUCE

Das ZIB vertreibt den LISP Dialekt Portable Standard LISP (PSL) in der Version 4.2 und das darauf aufbauende Programmsystem REDUCE für symbolische Mathematik (Anthony C. Hearn et al.). 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, U.K.), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Software-Händler in Japan, Korea, Indien, Griechenland und Polen.

An vielen Modulen wurden im Bereichszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der neuen REDUCE Version 3.7.

Ansprechpartner: Winfried Neun (<mailto:neun@zib.de>)

Beiträge des ZIB zu REDUCE:

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell, S. Kameny)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner-Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H.M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
INEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
LINALG	Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebbeck)
MATHML	Interface zu MathML (L. Alvarez)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)

NORMFORM	Normalformen von Matrizen (M. Rebeck, T. Moulders)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
QSUM	Summation von q-hypergeometrischen Termen (H. Böing, W. Koepf)
RATINT	Rationale Integration (N. Langmead)
RATAPRX	Rationale Approximation (L. Temme, W. Koepf)
REACTION	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. 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 zeitlich nach der letzten Version entwickelt wurden – über anonymous FTP abrufbar.

B Mathematica

SpecialFunctions

W. Koepf: *Ein Mathematica Package für die Behandlung von Differentialgleichungen, Rekursionsgleichungen, symbolischer Potenzreihen, orthogonaler Polynome und holonomer spezieller Funktionen.*

Ansprechpartner: Wolfram Koepf (<http://www.zib.de/koepf>)

C Maple

Verfügbar: <http://www.zib.de/koepf>

FPS D. Gruntz, W. Koepf: *Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.* Es ist ferner Teil der share library ab Maple Version V.3.

summation W. Koepf, G. Stölting: *Ein Maple Package für die symbolische Summation.* Es ist ferner Teil der share library ab Maple Version V.4.

sumtools	W. Koepf: <i>Eine Maple Library für die symbolische Summation</i> . Die Library ist Teil von Maple Version V.4.
hsum.mpl	W. Koepf: <i>Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities</i> .
qsum.mpl	H. Böing: <i>Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation</i> . Ansprechpartner: Wolfram Koepf (http://www.zib.de/koepf)

D Maple

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. Verfügbar: http://www.zib.de/gattermann Ansprechpartner: Karin Gattermann (mailto:gattermann@zib.de)

6.8 Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale

- **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) bereit gestellt, die im Rahmen des KOBV-Projektes am ZIB entwickelt wurde. Seit 12. November 2001 ist die zweite Version der KOBV-Suchmaschine mit erweiterten und verbesserten Web-Funktionalitäten im Probetrieb. Mit Hilfe der KOBV-Suchmaschine können Nutzer über das WWW in Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken recherchieren; Bibliothekare können über Z39.50 bibliographische Datensätze in ihre lokalen Systeme übernehmen. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig ausgebaut und neue Bibliotheken werden in den Service eingebunden.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Verbund (Index)**

Über die KOBV-Suchmaschine <http://www.kobv.de/suche> kann auch auf den KOBV-Verbund (Index) zugegriffen werden. Dieser sogenannte "Gemeinsame Index" wurde - neben dem Zugriff über die Verteilte Suche - im Rahmen des KOBV-Projektes aufgebaut, um den schnellen und stabilen Zugriff auf die Bestände der Bibliotheken zu gewährleisten. Während der Laufzeit des Projektes wurden zunächst die Daten der großen, häufig frequentierten Bibliotheken in

diesen Index eingespielt. Inzwischen baut die KOBV-Zentrale den Index kontinuierlich aus. Für die Aktualisierung setzt die KOBV-Zentrale verschiedene Verfahren ein: Online-Update, Update über Z39.50 und Offline-Update.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **Fremd- und Normdatenserver**

In der KOBV-Zentrale 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), die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND), Schlagwortnormdatei (SWD) sowie die Titeldaten der Zeitschriftendatenbank (ZDB). Die Daten werden wöchentlich aktualisiert (Update der Zeitschriften-Titeldaten nach Umstellung auf ALEPH Version 14.2). Die Fremd- und Normdaten werden von den KOBV-Bibliotheken über die 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.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **WWW-Z39.50 Gateway**

Das im Rahmen einer Diplomarbeit während des KOBV-Projektes 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. In der KOBV-Zentrale 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 ist zu finden unter <http://www.biblio.tu-bs.de/zack> in Braunschweig.

Ansprechpartner: Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de), Wolfram Schneider (wosch@infonie.de)

- **KOBV-Hotline**

Unter der E-Mail-Adresse kobv-zt@zib.de hat die KOBV-Zentrale eine Hotline eingerichtet, an die sich Nutzer und Bibliothekare bei akuten Problemen mit der KOBV-Suchmaschine bzw. bei allgemeinen Fragen zum KOBV oder zur KOBV-Suchmaschine wenden können. Die Mails unter der Sammeladresse kobv-zt@zib.de gehen an die gesamte KOBV-Zentrale, so daß auch bei Abwesenheit eines oder mehrerer Mitarbeiter und in Urlaubszeiten eine rasche Fehlerbehebung und eine schnelle und qualifizierte Beantwortung der Fragen garantiert ist.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Litsche (litsche@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Dagmar Otto (otto@zib.de), Oliver Rudzick (rudzick@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Informationsserver**

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de> wird das zentrale WWW-Informationenangebot zum Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) angeboten.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

6.9 Math-Net Informationsserver

Unter der WWW-Adresse <http://www.math-net.org> 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.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de), Winfried Neun (neun@zib.de), Wolfram Sperber (sperber@zib.de)

6.10 Informationsdienste des eLib-Servers

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

Der deutsche Spiegel der *Netlib* (<http://elib.zib.de/netlib/>) erlaubt den schnellen Zugriff auf eine für Numeriker und Anwender wichtige Sammlung mathematischer Software und Daten. 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 (<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-Net (<http://www.math-net.de/>).

Eine umfangreiche Sammlung von Links auf weltweit verfügbare mathematische Ressourcen wird über die *Math-Net Links to the Mathematical World* (<http://www.math-net.de/links/>) angeboten, die ebenfalls zu den Kernbestandteilen des Math-Net gehören.

Das Opt-Net als elektronisches Forum für Optimierer besteht seit 1993. Umfangreiche Arbeiten sind im Berichtszeitraum für die Analyse und Portierung der Software an neuere Betriebssystemarchitekturen aufgewendet worden. Ein besonderes Anliegen bestand auch in der Verwendung von Standardtools, die als Open-Domain Software zur Verfügung stehen. Dazu gehören MySQL als unterliegende Datenbank, PERL und PHP als Programmiersprache und Schnittstelle zwischen Datenbank und Benutzer. Der ursprüngliche mail-orientierte Ansatz der Benutzerschnittstelle ist vollständig auf moderne WWW basierte Formulare angepasst.

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 der *International Commission of Mathematical Instruction (ICMI)*, der *Commission on Development and Exchange (CDE)* und der *International Commission on the History of Mathematics (ICHM)*.

Der ICM'98-Server 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.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

6.11 GOS — Datenbank für kulturgeschichtliche Daten

Das System GOS dient zur Unterstützung der Inventarisierung und Dokumentation im Museum. GOS bietet Datenstrukturen und Verarbeitungsmodule an, die den komplexen Informationsstrukturen in diesem Bereich besonders angepaßt sind. GOS wird vom ZIB in der Form PC-GOS (für Personal Computer) weitergegeben.

Ansprechpartner: Carlos Saro (saro@zib.de)

6.12 SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplex-Verfahrens. Es beinhaltet primale wie duale Lösungsroutinen und ist als C++-Klassenbibliothek implementiert.

SoPlex kann sowohl als Unteroutine in anderen Programmen als auch selbständig verwendet werden und Probleme im MPS- und LP-Format einlesen.

Der Code wurde von Roland Wunderling am ZIB als Teil seiner Dissertation *Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus* (ZIB-Preprint 96-09) entwickelt.

Derzeit wird eine komplette Überarbeitung des Codes durchgeführt, um eine Übereinstimmung mit den aktuellen C++-Standards und die Kompilierfähigkeit auf gängigen Plattformen sicherzustellen.

Weitere Informationen finden sich unter

<http://www.zib.de/Optimization/Software/Soplex>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

6.13 MCF

MCF ist eine Implementierung eines primalen und dualen Netzwerk-Simplex-Algorithmus zur Lösung linearer Netzwerk-Fluß-Probleme. Für eine akademische Nutzung ist MCF frei verfügbar.

Das Programmpaket wurde evaluiert anhand mehrerer Klassen verschiedener mit NETGEN erzeugter Standardprobleme und mit Instanzen realer Anwendungen aus der Fahrzeugeinsatzplanung im ÖPNV und der Telekommunikation. Rechentests auf diesen Beispielen zeigten immer ein hervorragendes Laufzeitverhalten von MCF. Selbst riesige Instanzen aus der Praxis mit mehreren tausend Knoten und hundertmillionen Bögen können innerhalb kürzester Zeit optimal gelöst werden.

MCF findet derzeit Anwendung in verschiedenen Bereichen. Neben Integrationen in kommerziellen Planungssystemen für den ÖPNV ist MCF ein Integer-Benchmark in der SPEC CPU 2000 Suite (siehe www.spec.org).

Von Antonio Frangioni ist eine C++-Portierung verfügbar, die verschiedene Implementierungen von Netzwerk-Fluß-Lösern vergleichbar macht (siehe <http://www.di.unipi.it/di/groups/optimize/Software/MCF.html>).

Ansprechpartner: Andreas Löbel (loebel@zib.de)

6.14 TOPCOM

TOCOM ist eine Programmsammlung zur Berechnung von Triangulierungen von Punktkonfigurationen und orientierten Matroiden. Der Implementierung liegt die Idee

zugrunde, die wesentlichen kombinatorischen Eigenschaften einer Punktconfiguration als orientiertes Matroid zu speichern. Damit können alle nachfolgenden Berechnungen koordinatenfrei und ohne Rundungsfehler erfolgen.

TOPCOM kann ab Version 0.10.0 (2001) auch die Regularität von Triangulierungen prüfen. Hierzu wird das *cddlib*-Paket von Komei Fukuda mit exakter Arithmetik benutzt.

Siehe <http://www.zib.de/rambau/TOPCOM> für ständig aktualisierte Informationen.

Ansprechpartner: Jörg Rambau (rambau@zib.de)

6.15 **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 License veröffentlicht.

Detaillierte Beschreibungen von *ldasim* liegen im ZIB-Report 00-33 vor, aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.zib.de/schintke/ldasim/>.

Ansprechpartner: Florian Schintke (schintke@zib.de).

6.16 **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)

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Wolfgang Baumann

16.01.2001 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der FHTW Berlin

03.07.2001 *Supercomputing am Rechenzentrum des ZIB*

Besuch von Studenten der FHTW Berlin

15.09.2001 *Hochleistungsrechner der Extraklasse*

Vorträge und Führungen anlässlich der “Langen Nacht der Wissenschaften“

26.09.2001 *Die Supercomputer im ZIB*

Besuch einer Schülergruppe im Rahmen eines FU-Seminars

Ralf Borndörfer

16.02.2001 *Duty Scheduling*

26. Berliner Algorithmntag, ZIB, Berlin

21.02.2001 *Alcuins Transportprobleme*

ZIB, Berlin

04.09.2001 *Scheduling Duties by Adaptive Column Generation*

Symposium über Operations Research 2001, Duisburg

12.10.2001 *Combinatorial Packing Problems*

Workshop „The sharpest cut“ in honor of Manfred Padberg’s 60th birthday, ZIB, Berlin

17.12.2001 *Duty Scheduling in Public Transit*

Tagung Mathematical Methods in Manufacturing and Logistics, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Manfred Brandt

- 18.09.2001** *On the Moments of the Overflow and Freed Carried Traffic for the GI/M/C/0 System*
Österreichische Mathematische Gesellschaft – 15. Kongreß und Jahrestagung der Deutschen Mathematikervereinigung, Wien, Österreich

Hubert Busch

- 15.09.2001** *Hochleistungsrechner der Extraklasse*
Vorträge und Führungen anlässlich der “Langen Nacht der Wissenschaften”

Frank Cordes

- 21.03.2001** *Molekülklassen im Rechner*
RiNA Workshop, Berlin
- 4.4.2001** *Virtual Screening of conformational libraries II*
Statusseminar AnalytiCon Discovery / ZIB, Berlin

Wolfgang Dalitz

- 30.03.2001** *Math-Net - a network for mathematicians*
The 7th International Conference of European University Information Systems (EUNIS 2001), Humboldt-Universität zu Berlin
- 10./11.07.2001** *Math-Net Site und Math-Net Dienste*
6. Math-Bib-Net Workshop, Göttingen
- 07./09.10.2001** *Math-Net – Recent Developments*
IuK-Workshop, Blaubeuren

Peter Deuffhard

- 16.01.2001** *Mathematik im Dienst der Medizin: Therapieplanung am virtuellen Patienten*
Kolloquium, Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg
- 19.01.2001** *Raumluftströmungssimulation mit adaptiven Multilevelverfahren mit den Programmen KASKADE/AMIRA*
DBU Statusseminar, ZIB
- 23.01.2001** *Der virtuelle Patient – Mathematik in der Krebstherapie*
Öffentlicher Vortrag, Berliner Verein zur Förderung des Mathematischen und Naturwissenschaftlichen Unterrichts (BMU), ZIB
- 27.02.2001** *From Molecular Dynamics to Conformation Dynamics in Computational Drug Design*
Kolloquium, Mathematics, EPFL, Lausanne, Schweiz

- 27.02.2001** *New Bioinformatics Curricula at the FU Berlin*
Fakultätskolloquium, EPFL, Lausanne, Schweiz
- 01.03.2001** *Numerische Mathematik und Biotechnologie: Entwurf von Medikamenten im virtuellen Labor*
Öffentlicher Vortrag anlässlich der Emeritierung von Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Roland Bulirsch, TU München
- 02.04.2001** *Clinical Therapy Planning by Virtual Patients*
Invited Talk, International Conference on Mathematical Modeling and Scientific Computing, METU, Ankara, Türkei
- 15.05.2001** *Numerische Mathematik und Biologie: Entwurf von Medikamenten im virtuellen Labor*
Festkolloquium anlässlich der Verleihung der ersten Urkunde für den Bachelor in Mathematics, Mathematisches Institut, Heinrich–Heine–Universität Düsseldorf
- 24.05.2001** *Fast Computation of Almost Invariant Sets in Molecular Biology and Data Mining*
6th SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems, Snowbird, Utah, USA
- 09.06.2001** *Metastable Conformations in Computational Drug Design*
Plenarvortrag, Belgian Mathematical Society (BMS) – Deutsche Mathematiker-Vereinigung (DMV) 2001 Meeting, University of Liège, Belgien
- 12.10.2001** *Comparative Concepts in Computational Mathematics and Chemistry*
Leopoldina Symposium “Chemistry and Mathematics: Two Scientific Languages of the 21st Century”, MPI für biophysikalische Chemie, Göttingen
- 06.11.2001** *An Adaptive Multilevel Scheme for Optimal Control Problems Based on a Function Space Interior Point Method*
Oberseminar Numerik und Wissenschaftliches Rechnen, MPI für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig
- Andreas Eisenblätter**
- 15.01.2001** *k-Partitionierung: semidefinite Schranken für ein Frequenzplanungsproblem*
Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“, Berlin
- 07.02.2001** *Techniques in GSM-frequency planning*
Anlässlich eines Besuches von Bouygues Telecom, ZIB, Berlin
- 04.09.2001** *Adapting GSM Frequency Plans Optimally*
SIAM-EMS Conference „Applied Mathematics in our Changing World“, Berlin

Bodo Erdmann**08.04.2001** *Effiziente und zuverlässige FE-Methoden*

Workshop Medicine Meets Mathematics: Hartgewebe-Modellierung Kloster Banz/Staffelstein

Hans-Hermann Frese**22.05.2001** *Evaluation of C++ Compilers for the Cray T3E*

CUG SUMMIT 2001, India Wells, CA, USA

Tobias Galliat**05.02.2001** *Informationsbewertendes Profiling unter Verwendung von Konzept-Hierarchien*

Hybris AG, Dresden

31.05.2001 *Informationsbewertendes Profiling versus Collaborative Filtering*

Yoolia AG, Berlin

11.12.2001 *Data Retrieval mittels selbstorganisierter neuronaler Netze*

Kolloquium des Fachbereichs Informationswissenschaft der Fachhochschule Köln

Karin Gatermann**01.05.2001** *Deformed toric varieties, the cones, and polynomial systems in chemistry*

Optimization seminar, University of California at Berkeley, USA

09.05.2001 *Sparse polynomial systems given by graphs*

Optimization seminar, University of California at Davis, USA

16.05.2001 *Sparse polynomial systems given by graphs*

Colloquium of the department of Mathematics, San Francisco State University, USA

01.06.2001 *Applications of SAGBI bases to dynamics*

IMACS - Applications of Computer algebra, 2001, Albuquerque, New Mexico, USA

24.08.2001 *Applications of SAGBI bases to dynamics*

Sektion Computer algebra and Computer analysis, 3rd ISAAC Congress, Berlin

03.09.2001 *Symbolic Computations for Systems in Chemistry*

SIAM-EMS Applied Mathematics in our changing world, Berlin

13.09.2001 *Applications of SAGBI bases to equivariant dynamics*

SFB-workshop SNSC '01, Schloß Hagenberg, Österreich

02.11.2001 *Symbolic computations for chemical reaction systems*

Symbolic Computation Seminar, University of Waterloo, Kanada

03.12.2001 *Symbolic computations for chemical reaction systems*

Workshop Computational Challenges in Dynamical Systems, The Fields Institute, Toronto, Kanada

Ralf Götz**06.04.2001** *Migration von STK RedWood- und 9840-Kassetten nach 9940A-Kassetten*

IGC-Frühjahrstagung 2001, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Universität Hannover

Martin Grötschel**08.01.2001** *Semidefinite Relaxierungen in der kombinatorischen Optimierung*

Kollegvorlesung des Graduiertenkollegs „Algorithmische Diskrete Mathematik“, ZIB, Berlin

01.02.2001 *Frequency Assignment in Mobile Phone Systems*

Vortrag an der Mathematisch-Physikalischen Fakultät der Karls-Universität, Prag, Tschechische Republik

11.03.2001 *„www.mathematik.de – ein Mathematik-Portal für die Öffentlichkeit“*

Workshop der IuK-Fachgruppe der DMV/ÖMG, Universität Trier

12.03.2001 *Cooperative Digital Libraries*

7. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, Universität Trier

15.03.2001 *The TSP and Its Variants: What's New?*

ADiMMO 2001, 6th Berlin-München-Trier Workshop on Algorithmic Discrete Mathematics and Mathematical Optimization, Universität Trier

20.03.2001 *Management des Problemlösungszyklus in der Industrie – Beiträge der Mathematik*

Symposium des Arbeitskreises „Mathematik in Forschung und Praxis“ zum Thema „Mathematik und Management“, Bad Honnef

05.04.2001 *Optimization of Telecommunication Networks*

ILOG, Paris, Frankreich

06.04.2001 *Assigning Channels in Mobile Phone Systems*

INRIA, Rocquencourt, Frankreich

24.04.2001 *Online-Optimierung: mathematische und praktische Aspekte*

Treffpunkt der Wissenschaften, Berlin

23.05.2001 *Frequency Assignment*

Kolloquium „Digitale Mobilkommunikation“, TU Berlin

- 30.05.2001** *Zukunft des wissenschaftlichen Publikationswesens (in der Mathematik): Math-Net, Standards und Archive*
ZIB, Berlin
- 03.07.2001** *Kombinatorische Online-Optimierung: mathematische und praktische Aspekte*
Kolloquium am Fachbereich „Mathematik und Informatik“, Universität Paderborn
- 05.07.2001** *Mathematik: Die verborgene Schlüsseltechnologie*
Vortrag an der C.F. Grabow-Gesamtschule, Prenzlau
- 10.07.2001** *Diskrete Mathematik, Informatik, Optimierung und Modellierung: Neue Themen für den Mathematikunterricht*
Sommerschule „Lust auf Mathematik“ der HU Berlin, Jugendbildungszentrum Blossin
- 06.09.2001** *Designing Telecommunication Networks: Challenges for Integer Programming*
EMS–SIAM Conference “Applied Mathematics in our Changing World”, Berlin
- 18.09.2001** *Math&Industry – wie macht man Anwendungen der Mathematik für Anwender im Web zugänglich?*
Österreichische Mathematische Gesellschaft – 15. Kongreß und Jahrestagung der Deutschen Mathematikervereinigung, Wien, Österreich
- 18.09.2001** *Diskrete Mathematik und Optimierung: Themen für den Mathematikunterricht?*
Österreichische Mathematische Gesellschaft – 15. Kongreß und Jahrestagung der Deutschen Mathematikervereinigung, Wien, Österreich
- 12.10.2001** *On the Cycle Polytope of Matroids*
Workshop „The sharpest cut“ in honor of Manfred Padberg’s 60th birthday, ZIB, Berlin
- 18.10.2001** *Empfehlungen des Wissenschaftsrates aus Sicht der IuK*
Workshop „Digitale Bibliotheken und Portale“, DDB, Frankfurt am Main
- 23.10.2001** *Digitale Informationsversorgung durch Hochschulbibliotheken*
1. KOBV-Forum, ZIB, Berlin
- 20.11.2001** *Matroids and Independence Systems*
Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ekuador
- 21.11.2001** *Stable Sets, Set Partitioning, and Applications*
Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ekuador
- 22.11.2001** *The Travelling Salesman and Related Problems*
Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ekuador
- 23.11.2001** *Large Scale Transportation Systems*
Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ekuador

24.11.2001 *Combinatorial Optimization in Telecommunication*

Escuela Politecnica Nacional, Quito, Ekuador

07.12.2001 *Making Math-Net international: an IMU project*

First International Technical Workshop of the project SINN – Searchengine Network in the International Natural Science Network, Universität Oldenburg

19.12.2001 *Location Problems in Telecommunication*

Workshop „Mathematical Methods in Manufacturing and Logistics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

21.12.2001 *Färbungsprobleme und Anwendungen*

Bielefelder Mathematisches Kolloquium, Universität Bielefeld

Hans-Christian Hege**30.01.2001** *Introduction to Visual Data Analysis*

Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

31.01.2001 *Real Time Computer Graphis*

Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

01.02.2001 *Data Representation and Visualization Systems*

Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

02.02.2001 *Linear Transport Theory and Visualization of Scalar Fields*

Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

09.02.2001 *AMIRA - Selected Features and Bone Analysis*

Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin (mit AMIRA-Vorführung durch Steffen Prohaska)

07.04.2001 *Virtual Reality in der Medizin*

Kloster Banz/Staffelstein (Bayern), Tagung „Medicine meets Mathematics - Modellierung von Hartgewebe“ (zusammen mit Stefan Zachow)

05.07.2001 *Research Perspectives in 3D Visualization*

ZIB, Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“

15.08.2001 *Data Visualization: AMIRA and Open Inventor*

Open Inventor „Birds of a Feather“ Meeting, Los Angeles, USA, ACM SIGGRAPH 2001

15.09.2001 *3D-Kino – Reise durch die Dimensionen*

Lange Nacht der Wissenschaften, Wissenschaftssommer Berlin 2001, ZIB (zusammen mit Malte Zöckler und Steffen Prohaska)

- 27.09.2001** *Distributed Data Visualization and Shared Virtual Environments*
Inauguration: CoLaborator Center, Politehnica University of Bucharest, Rumänien
- 15.10.2001** *An Extensible Software Environment for Virtual Laboratories*
Workshop „Integration of Algebra and Geometry Software Systems“, Dagstuhl
- 26.10.2001** *3D-Kino – Reise durch die Dimensionen*
ZKI Arbeitstagung Supercomputing, ZIB (zusammen mit Detlev Stalling und Steffen Prohaska)
- 19.11.2001** *Entwicklung grid-basierter Simulations- und Visualisierungstechniken*
DFN-Symposium 2001, ZIB
- 05.12.2001** *Tele-Immersion, CSCW and Distributed Virtual Laboratories*
Grid Luminaries Meeting, IBM London, UK
- 07.12.2001** *Applications of Mathematical Visualization*
Workshop „Mathematical Visualization“ in Maubeuge, Frankreich

Christoph Helmberg

- 10.01.2001** *Clustern von Daten durch semidefinite Optimierung*
Universität Kaiserslautern
- 15.01.2001** *Semidefinite Optimierung*
Graduiertenkolleg „Algorithmische Diskrete Mathematik“, Berlin
- 02.03.2001** *Numerical Experiments with a Semidefinite Programming Bound for Spin Glasses*
Workshop „Algorithmic Techniques in Physics“, Schloß Dagstuhl, Wadern
- 30.05.2001** *Nonlinear Methods for Combinatorial Optimization*
Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken
- 02.06.2001** *Computing Semidefinite Bounds for Max-Clique*
Workshop Max-Clique’01, Klagenfurt, Österreich
- 06.06.2001** *Tutorial „The Spectral Bundle Method“*
6th International Conference on High Performance Optimization Techniques, Utrecht, Niederlande
- 03.07.2001** *Graphenpartitionierung mit semidefiniten Methoden*
Universität Chemnitz
- 04.07.2001** *Graphenpartitionierung mit semidefiniten Methoden*
Universität Erlangen-Nürnberg
- 04.09.2001** *Lower Bounds for Frequency Assignment in GSM Networks via Semidefinite Relaxations*
First SIAM-EMS-Conference, Berlin

13.10.2001 *A Semidefinite Cutting Plane Approach to Quadratic 0-1 Programming*
Workshop „The sharpest cut“ in honor of Manfred Padberg’s 60th birthday, ZIB,
Berlin

17.12.2001 *Scheduling Trucks for Supply Management*
Workshop „Mathematical Methods in Manufacturing and Logistics“, Mathema-
tisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Thorsten Hohage

05.09.01 *Pole condition: Analysis of time-harmonic scattering problems based on the pole condition and convergence of the PML method*
First SIAM-EMS Conference on Applied Mathematics in Our Changing World,
Berlin

Cornelia Kober

23.07.2001 *Anisotrope Materialmodellierung im menschlichen Unterkiefer*
8. Workshop „Die Methode der Finiten Elemente in der Biomedizin, Biomecha-
nik und angrenzenden Gebieten“, Universitätsklinikum / Universitätsrechenzen-
trum, Ulm

04.09.2001 *Individual Biomechanics of the Human Mandible: Simulation and Mode-
ling*
First SIAM-EMS Conference on Applied Mathematics in our Changing World,
Berlin

04.09.2001 *Simulation of Shape Memory Alloy reinforced Composite Material*
First SIAM-EMS Conference on Applied Mathematics in our Changing World,
Berlin

Arie M. C. A. Koster

08.01.2001 *Graph Coloring and Frequency Assignment*
Kolloquium der Graduiertenkollegs „Algorithmische Diskrete Mathematik“ und
„Combinatorics, Geometry, and Computation“, ZIB, Berlin

07.02.2001 *Optimization of Optical Networks*
Anlässlich eines Besuches von Bouygues Telecom, ZIB, Berlin

06.06.2001 *Treewidth: Computational Experiments*
1st Cologne Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization
(CTW 2001), Universität zu Köln

19.06.2001 *Upper bounds for Treewidth, Lower bounds for Frequency Assignment*
INFORMS International Conference, Maui, Hawaii, USA

19.06.2001 *Design of Optical Networks*
INFORMS International Conference, Maui, Hawaii, USA

- 08.08.2001** *Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)*
Anlässlich eines Besuches von ADVA AG Optical Networking, ZIB, Berlin
- 04.–05.12.2001** *Forschungsaufenthalt zum Thema „Frequency Assignment“*
Department of Quantitative Economics, Universität Maastricht, Niederlande
- 06.–07.12.2001** *Forschungsaufenthalt zum Thema „Treewidth and Combinatorial Optimization“*
Institute of Information and Computing Science, Universität Utrecht, Niederlande
- 13.12.2001** *Optimierung optischer Netze*
Telekom Austria AG, Wien, Österreich

Sven Krumke

- 11.–18.03.2001** *Forschungsaufenthalt bei Gerhard Woeginger*
Technische Universität Graz, Österreich
- 13.03.2001** *Online-Disposition von Fahrzeugen*
Gastvortrag am Institut für Statistik und Operations Research, Universität Graz, Österreich
- 14.06.2001** *Multiple Hotlink Assignment*
27th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Boltenhagen
- 14.06.2001** *De Bruijn graphs and DNA graphs*
27th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Boltenhagen
- 27.08.2001** *News from the Online Traveling Repairman*
26th International Symposium on Mathematical Foundations of Computer Science, Mariánské Lázně, Tschechische Republik
- 03.09.2001** *Online Dial-a-Ride Problems: Theory and Practice*
First SIAM-EMS Conference, Berlin
- 20.12.2001** *Online Dispatching of Service Vehicles*
Workshop „Mathematical Methods in Manufacturing and Logistics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Monika Kuberek

- 05.04.2001** *KOBV : institutionalisiert*
91. Deutscher Bibliothekartag “Bibliotheken - Portale zum globalen Wissen”, Bielefeld
- 01.06.2001** *Cooperative Library Network Berlin-Brandenburg - A New Library Consortium*
Besuch der Tschechischen Nationalbibliothek Prag im ZIB

17.10.2001 *Der KOBV - eine regionale Service-Einrichtung für Nutzer und Bibliotheken*

Erste Gemeinsame Fachtagung der DBV-Landesverbände Berlin und Brandenburg, "Wir machen den Weg frei: Fusionen - Kooperationen in Berlin und Brandenburg" in Berlin

23.10.2001 *Zum Stand des KOBV - Aufbau, Struktur, Aufgaben*

1. KOBV-Forum im ZIB

27.11.2001 *Neues aus dem KOBV - Aufbau/Struktur, Entwicklungen, Planungen*

Jahrestagung des Berufsverbandes Information Bibliothek (BIB), Landesgruppe Berlin in Berlin

Jens Lang**17.01.2001** *Mathematik in der Krebstherapie*

Institut für Numerische Mathematik, MLU Halle–Wittenberg

03.05.2001 *Schnelle und zuverlässige Löser für Mehrskalenprobleme*

Fachbereich Mathematik, Universität Potsdam

24.05.2001 *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*

CHT'01: Advances in Computational Heat Transfer, Cairns, Australia

10.07.2001 *Schnelle und zuverlässige Löser für Mehrskalenprobleme*

Universität Jena

03.08.2001 *Adaptive Simulation of Dopant Diffusion in Silicon*

International Conference on Scientific Computation and Differential Equations, Vancouver, Canada

Monika Lill**29.11.2001** *Erste Erfahrungen mit der Pflege von Normdaten durch Zusammenarbeit mit dem KOBV aus der Sicht des KOBVs*

16. Tagung des SISIS Anwenderforums Berlin-Brandenburg in der FHTW Berlin

Andreas Löbel**18.10.2001** *Parameter der automatischen ZIB-Dienstbildung/Optimierung ds-opt*

Produktpräsentation für die Berliner Verkehrsbetriebe (BVG), ZIB, Berlin

Stefan Lohrum**23.10.2001** *Die neue Version der KOBV-Suchmaschine*

1. KOBV-Forum im ZIB

Joachim Lügger

- 23. Oktober 2001** *Auf dem Weg zum KOBV-Informationsportal*
1. KOBV-Forum im ZIB

Sascha Georg Lukac

- 27.11.2001** *Geschichte und Gegenwart des Zugverkehrs: Von der ersten Dampflokomotive bis zur Privatisierung in GB*
Kolloquium, ZIB, Berlin

Frank Lutz

- 21.09.2001** *Triangulierte Mannigfaltigkeiten mit wenigen Ecken*
Österreichische Mathematische Gesellschaft – 15. Kongreß und Jahrestagung der Deutschen Mathematikervereinigung, Wien, Österreich
- 18.10.2001** *How to Recognize the Topological Type of a Manifold?*
Dagstuhl-Seminar „Integration of Algebra and Geometry Software Systems“, Schloss Dagstuhl, Wadern
- 05.11.2001** *How to Recognize the Topological Type of a Manifold?*
Colloquium of the European Graduate Program „Combinatorics, Geometry, and Computation“, FU Berlin
- 14.12.2001** *Heuristiken zum Erkennen des topologischen Typs einer Mannigfaltigkeit*
Sächsischer Geometrietag 2001, Chemnitz

André Merzky

- 18.09.2000** *Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie*
Tagung des Fachausschusses “Computergraphik“ der Gesellschaft für Informatik (GI) im ZIB (zusammen mit Werner Bengler und Ralf Kähler)

Michael Meyer

- 22.5.2001** *Quantenchemische Untersuchungen an Quartetts*
15. Darmstadter Molecular Modelling Workshop
- 12.2.2001** *Quantenchemische Untersuchungen an Nukleinsäure Basenpaaren und Quartetts*
Seminar Moleküle im Rechner, FU-Berlin
- 4.4.2001** *Virtual Screening of conformational libraries I*
Statusseminar AnalytiCon Discovery / ZIB, Berlin

Ulrich Nowak**28.03.2001** *Differentialgleichungen in der Praxis*

Vortrag mit SoftwareDemo. ZIB, beim Besuch einer Studentengruppe der Universität Osnabrück

03.05.2001 *Adaptive numerische Integration von gewöhnlichen Differentialgleichungen*

Vortrag mit SoftwareDemo. GFZ, Sektion 1.2 Oberpfaffenhofen

18.05.2001 *Differentialgleichungen in der Praxis*

Vortrag mit SoftwareDemo. ZIB, beim Besuch einer Studentengruppe der TFH Wildau

26.11.2001 *LIMEXx - Numerische Software fuer differentiell-algebraische Systeme*

Vortrag Universität Stuttgart, Inst. f. Chem. Verfahrenstechnik

Olaf Paetsch**28.03.2001** *Wie kommt ein Bild auf den Computer*

Lehrerfortbildung der Berliner MNU, ZIB

Diana Poensgen**11.–18.03.2001** *Forschungsaufenthalt bei Gerhard Woeginger*

Technische Universität Graz, Österreich

16.04.–18.05.2001 *Forschungsaufenthalt bei Alberto Marchetti-Spaccamela*

Università di Roma „La Sapienza“, Italien

02.07.2001 *Online Call Admission in Optical Networks*

Graduiertenkolleg „Combinatorics, Geometry and Computation“, Berlin

19.11.2001 *News from the Online Traveling Repairman*

Graduiertenkolleg „Combinatorics, Geometry and Computation“, Berlin

Steffen Prohaska**09.02.2001** *AMIRA - Selected Features and Bone Analysis*

Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin, Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“ (zusammen mit Christian Hege)

09.02.2001 *Resampling*

Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“

26.06.2001 *Visualization and processing of network structures in AMIRA*

INRIA Sophia-Antipolis, Nice, Frankreich, (zusammen mit Malte Zöckler)

05.07.2001 *Resampling Bone Images*

ZIB, Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“

15.09.2001 *3D-Kino – Reise durch die Dimensionen*

Lange Nacht der Wissenschaften, Wissenschaftssommer Berlin 2001, ZIB (zusammen mit Christian Hege und Malte Zöckler)

22.11.2001 *Large Data Access, an interactive data interface for AMIRA.*

Projekttreffen MicroVisu3D, ZIB, (zusammen mit Malte Zöckler)

18.12.2001 *Visualization of Bone Biopsies with AMIRA*

Universität Potsdam, Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“

18.12.2001 *Towards a Skeletonization of the Trabecular Network of a Bone Biopsy*

Universität Potsdam, Projekttreffen „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“

Jörg Rambau**11.–18.03.2001** *Forschungsaufenthalt bei Gerhard Woeginger*

Technische Universität Graz, Österreich

06.07.2001 *Realtime Dispatching of Automobile Service Units for ADAC*

27. Berliner Algorithmentag, HU Berlin

03.09.2001 *Concepts in Online-Optimization*

Workshop MOMENTUM-Projekt, ZIB, Berlin

03.09.2001 *Realtime Dispatching of Automobile Service Units for ADAC*

First SIAM-EMS-Conference, Berlin

15.09.2001 *Probieren geht über Studieren? Entscheidungshilfen für kombinatorische Online-Optimierungsprobleme in der innerbetrieblichen Logistik*

Abschlußkolloquium „Echtzeit-Optimierung großer Systeme“, Berlin

05.10.2001 *Triangulations of Cyclic Polytopes: A Friendly World With no Limits on the (Co-)Dimension*

Herbstschule „Discrete Geometry—Triangulations From Various Points of View“ des Graduiertenkollegs „Combinatorics, Geometry, and Computation“, Alt-Ruppin bei Berlin

09.10.2001 *Where is the Elevator? The Hard Life of Combinatorial Online Algorithms for Transportation Problems*

Workshop „Analyse und Optimierung“ des Graduiertenkollegs „Angewandte Algorithmische Mathematik“, TU München

15.10.2001 *TOPCOM: Making Use of Oriented Matroids in Discrete Geometry*

Workshop „Integration of Algebra and Geometry Software Systems“, Schloß Dagstuhl, Wadern

18.10.2001 *A New View on the Cayley Trick*

Workshop „Integration of Algebra and Geometry Software Systems“, Schloß Dagstuhl, Wadern

Alexander Reinefeld**15.01.2001** *Perspektiven im Grid Computing*

BMBF, Bonn

24.03.2001 *Building a Grid for Worldwide Distributed Data-Intensive Applications*

eingeladener Vortrag, Annual Meeting of the Finnish Physical Society, 35th Physics Days, Jyväskylä

28.05.2001 *How to Build a High-Performance Compute Cluster for the Grid*

DESY, Hamburg

13.06.2001 *Integrating Local Resources into the Grid: The Resource Specification Problem*

Seminar: Management of Metacomputers, Schloß Dagstuhl

03.07.2001 *How to Build a High-Performance Compute Cluster for the Grid*

GSI, Darmstadt

03.09.2001 *How to Build a High-Performance Compute Cluster for the Grid*

ICPP/MSA, Valencia, Spanien

25.10.2001 *Bericht zum Stand des Höchstleistungsrechners Nord*

Arbeitskreis ZKI Supercomputing, ZIB Berlin

11.–12.12.2001 *Building Clusters for Data-Intensive Applications in the Grid*

AURORA International Grid Workshop, Vienna

13.12.2001 *How to Build Reliable High-Performance Clusters for the Grid*

Autonomic Computing Workshop, IBM Böblingen Lab

Stefan Röhl**27.08.2001** *A Linear Programming Approach to Solving Optimal Stopping Problems*

9th International Conference on Stochastic Programming, Berlin

Beate Rusch**20.09.2001** *Die zweite Version der KOBV-Suchmaschine - ein regionales Portal für Berlin und Brandenburg?*

Sun Summit Digitale Bibliotheken 2001, München

23.10.2001 *Der KOBV-Bibliothekenführer*

1. KOBV-Forum im ZIB

Carlos Saro

24.10.2001 *Die Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums, Berlin im Intra- und im Internet*

Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund am ZIB

4.12.2001 *Datenbanken im Internet*

Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur, Leipzig

Frank Schmidt

05.09.01 *Pole condition: A new approach to solve scattering problems*

First SIAM-EMS Conference on Applied Mathematics in Our Changing World, Berlin

Johannes Schmidt-Ehrenberg

02.-05.04.2001 *Advanced visualization with AMIRA*

Training class, TGS Inc., Houston, Texas, USA

Martin Seebaß

24.09.2001 *Hyperthermie-Planung*

Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Medizinische Physik, Berlin

Wolfram Sperber

01.02.2001 *Einige Bemerkungen zur Math-Net Seite*

Carmen-Workshop Bonn, IZ Sozialwissenschaften Bonn

11.03.2001 *Erstellen der Math-Net Seite: Der Math-Net Page Maker*

IuK2001: 'Cooperative Systems', Universität Trier, Sitzung der IuK-Fachgruppe

10.-17.2.2001 *Math-Net - an approach for a distributed information system in Mathematics*

8. Crimea Conference; zusammen mit J. Kallies und B. Wegner

16.09.2001 *Math-Net Page Maker - a Math-Net Tool*

Electronic Media in Mathematics, Coimbra, Portugal

18.09.2001 *Internationalisierung des Math-Net am Beispiel der Math-Net Seite*

DMV-Tagung 2001, Wien, Sitzung der IuK-Fachgruppe

25.9.2001 *Mathematical Knowledge Management and Math-Net: Semantics, Visualization and Internationalization of Math-Net*

Mathematical Knowledge Management 2001, Schloss Hardenberg; zusammen mit R. Schwänzl

Detlev Stalling

12.10.2001 *Stereoscopic 3D-Data Visualization with AMIRA*

ITG-Fachdiskussion 3D-Bewegtbilddarstellung, Heinrich-Hertz-Institut, Berlin

26.10.2001 *3D-Kino – Reise durch die Dimensionen*

ZKI Arbeitstagung Supercomputing, ZIB (zusammen mit Hans-Christian Hege und Steffen Prohaska)

Regine Stein

24.10.2001 *Die Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums, Berlin im Intra- und im Internet*

Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund am ZIB

04.12.2001 *Datenbanken im Internet*

Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur, Leipzig

Marc Steinbach

06.04.2001 *Optimierung im Gasmanagement*

BMBF-Workshop „Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft“, Berlin

27.06.2001 *Vorausschauende Online-Prozessregelung mittels Dynamischer Stochastischer Optimierung*

Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin

16.08.2001 *Look-Ahead Online Control of a Distillation Process*

University of Cambridge, England

28.08.2001 *The Tree-Sparse Interior Approach to Multistage Stochastic Programming*
9th International Conference on Stochastic Programming, Berlin

14.09.2001 *Online-Regelung von Destillationsprozessen durch mehrstufige stochastische Optimierung*

Abschlußkolloquium des DFG-Schwerpunktprogramms „Echtzeioptimierung großer Systeme“, Berlin

Thomas Steinke

15.09.2001 *Hochleistungsrechner der Extraklasse*

Vorträge und Führungen anlässlich der “Langen Nacht der Wissenschaften”

Manfred Stolle

05.04.2001 *Eine SAN-Testinstallation im ZIB*

IGC-Frühjahrstagung 2001, 05.-06.04.2001, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Universität Hannover

19.04.2001 *Fast File Transfer in a Secure Environment*

Large Scale Storage in the Web, Eighteenth IEEE Symposium on Mass Storage Systems in Cooperation with the Ninth NASA Goddard Conference, April 17-20, Hyatt Regency Islandia, San Diego, USA

Hinnerk Stüben**21.03.01** *Full QCD simulations on Hitachi SR8000*

EU IHP Network on Hadron Phenomenology from Lattice QCD, Joint Training Course: Algorithms, Actions and Computers; Wuppertal, 21.–24. März 2001

15.09.2001 *Hochleistungsrechner der Extraklasse*

Vorträge und Führungen anlässlich der “Langen Nacht der Wissenschaften“

Annegret Wagler**14.06.2001** *Critical and anticritical edges in perfect graphs*

27th Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Boltenhagen

11.10.2001 *Relaxing Perfectness: Which Graphs are more or less Almost Perfect?*

Workshop „The sharpest cut“ in honor of Manfred Padberg’s 60th birthday, ZIB, Berlin

Steffen Weider**29.03.2001** *Der Volume-Algorithmus und eine Anwendung auf das Set-Partitioning-Problem*

ZIB, Berlin

06.04.2001 *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV*

BMBF-Workshop Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft, Berlin

Martin Weiser**21.06.2001** *Affine Invariance Concepts applied to Central Path Methods for Optimal Control*

Kolloquium, Fachbereich Mathematik, TU Berlin

18.07.2001 *Waveletmethoden zur Bildkompression*

Disputationsvortrag, FU Berlin

24.07.2001 *The Central Path towards the Numerical Solution of Optimal Control Problems*

20th IFIP TC 7 Conference on System Modelling and Optimization, Trier

03.09.2001 *The Central Path towards the Numerical Solution of Optimal Control Pro-*

blems

First SIAM-EMS Conference on Applied Mathematics in Our Changing World,
Berlin

Roland Wessälly

11.05.2001 *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*
Mannesmann-Innovationspreisverleihung, Dresden

29.06.2001 *Standortplanung*
Telekom Austria AG, Wien, Österreich

22.09.2001 *Optimization in Telecommunications*
Business School, Fribourg, Schweiz

Stefan Zachow

07.04.2001 *Virtuelle Realität in der chirurgischen Planung*
Symposium 2001, Medicine meets Mathematics, Kloster Banz / Staffelstein,
Bayern (zusammen mit H.-C. Hege)

19.07.2001 *3D Osteotomieplanung in der MKG-Chirurgie unter Berücksichtigung
der räumlichen Weichgewebeanordnung*
SFB 414 Tagung, Rechner- und sensorgestützte Chirurgie, DKFZ, Heidelberg

15.10.2001 *Improved 3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery*
Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI), Ut-
recht, The Netherlands

Malte Zöckler

06.03.2001 *Medical Visualization with AMIRA*
Institut national de la sante et de la recherche medical (INSRERM), Toulouse,
Frankreich

26.06.2001 *Visualization and processing of network structures in AMIRA*
INRIA Sophia-Antipolis, Nice, Frankreich (zusammen mit Steffen Prohaska)

15.09.2001 *3D-Kino – Reise durch die Dimensionen*
Lange Nacht der Wissenschaften, Wissenschaftssommer Berlin 2001, ZIB (zu-
sammen mit Christian Hege und Steffen Prohaska)

25.10.2001 *Wissenschaftliche Visualisierung in immersiven Umgebungen*
Grafiktag 2001 des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der
Wissenschaften (LRZ), München

22.11.2001 *Large Data Access, an interactive data interface for AMIRA.*
Project Meeting MicroVisu3D, ZIB, (zusammen mit Steffen Prohaska)

Adrian Zymolka

04.05.2001 *Optische Netze: Modellierung und Optimierung*

Telekom Austria AG, Wien, Österreich

09.07.2001 *Kunterbunte Optimierung: Graphfärbung und ihre Anwendungen*

ZIB, Berlin

08.08.2001 *Entwurf optischer Telekommunikationsnetze*

Anlässlich eines Besuches von ADVA AG Optical Networking, ZIB, Berlin

04.09.2001 *Stable multi-sets*

Symposium on Operations Research 2001, Duisburg

13.12.2001 *Optimierung optischer Netze mit dem Software-Tool OND*

Telekom Austria AG, Wien, Österreich

7.2 Vorlesungen und Seminare

Wolfgang Baumann: TU Berlin

WS 2000/01 *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure* (Integrierte Lehrveranstaltung, mit Frank Thiele)

Wolfgang Baumann: FU Berlin

19.–23.02.2001 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Lehrveranstaltung mit Alexander Reinefeld und Hinnerk Stüben)

Wolfgang Baumann: RRZN Hannover

16.–18.07.2001 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Kurs mit Hinnerk Stüben)

Ralf Borndörfer: TU Berlin

WS 01/02 *Analysis I für Ingenieure (ET)* (Vorlesung)

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 01 *Funktionentheorie* (Vorlesung/Übung)

Frank Cordes: FU Berlin

WS 00/01 *Von der Sequenz zur Struktur und Funktion von Biomolekülen* (Vorlesung)

WS 00/01 *Moleküle im Rechner* (Seminar, Mitveranstalter: Ch. Schütte und B. Schmidt, FU Berlin)

Peter Deuffhard: FU Berlin**WS 00/01, SS 01** *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing*

(Mitveranstalter: E. Bänsch (FU/WIAS), H. Gajewski (FU/WIAS), R. Klein (FU/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FU), R. März (HU), Ch. Schütte (FU), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TU))

WS 01/02 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden*

(Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), R. Kornhuber (FU), Ch. Schütte (FU))

Karin Gatermann: FU Berlin**WS 00/01** *Computeralgebra* (Vorlesung/Übung)**Martin Grötschel: TU Berlin****WS 00/01** *Algorithmische Diskrete Mathematik 2: Lineare Optimierung* (Vorlesung)**SS 01** *Theorie und Praxis der kombinatorischen Optimierung* (Vorlesung)**SS 01** *Grundlegende Algorithmen der Optimierung* (Seminar)**Hans-Christian Hege: UPF Barcelona****WS 2000/2001** *Algorithms and Techniques for Visual Data Analysis* (Vorlesung)**Christoph Helmberg: TU Berlin****WS 01/02** *Konvexe Analysis* (Vorlesung)**Sven Krumke: TU Berlin****WS 00/01** *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)**SS 01** *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)**WS 01/02** *Online-Optimierung* (Vorlesung)**Monika Kuberek: HU Berlin**

WS 01/02 *Bibliothekarische Verbände* (Blockseminar im Studiengang Wissenschaftliche Bibliothekarin/Wissenschaftlicher Bibliothekar des Postgradualen Fernstudiums am Institut für Bibliothekswissenschaft der HU Berlin)

Jens Lang: FU Berlin**SS 2001** *Theorie und Numerik von Algebra-Differentialgleichungen* (Vorlesung)**SS 2001** *Einführung in die Numerik Gewöhnlicher Differentialgleichungen* (Kurs)

Jens Lang: Martin–Luther–Universität Halle–Wittenberg

SS 2001 *Numerik für Wirtschaftsmathematiker* (Vorlesung)

SS 2001 *Adaptive Lösung von Parabolischen Differentialgleichungen* (Vorlesung)

SS 2001 *Numerik für Differentialgleichungen* (Seminar)

Frank Lutz: TU Berlin

WS 00/01 (*ADM II*) *Lineare Optimierung* (Übung/Programmierbetreuung)

SS 01 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

SS 01 *Grundlegende Algorithmen der Optimierung* (Seminar)

WS 01/02 *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)

WS 01/02 *Computational Convexity* (Seminar)

Jörg Rambau: TU Berlin

WS 00/01 *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

WS 01/02 *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

WS 00/01 *Architektur und Programmierung paralleler Hochleistungsrechner* (Vorlesung mit Übungen; Mitveranstalter Jens Simon)

SS 01 *Management von Linux-Clustern* (Projektseminar mit Jens Simon und Florian Schintke)

SS 01 *Parallele Algorithmen in der Bioinformatik* (Seminar mit Thomas Steinke)

SS 01 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Praktikum mit Wolfgang Baumann und Hinnerk Stüben)

WS 01/02 *Mobile Computing* (Seminar mit Florian Schintke)

Marc Steinbach: TU Berlin

WS 00/01 *Mehrstufige konvexe stochastische Optimierung* (Vorlesung)

WS 01/02 *Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse* (DECHEMA-Weiterbildungskurs; in Zusammenarbeit mit Günter Wozny und Pu Li, TU Berlin, und René Henrion, WIAS)

Thomas Steinke: HU Berlin

SS 01 *Parallele Algorithmen in der Bioinformatik* (Seminar)

Mitveranstalter: Alexander Reinefeld

Hinnerk Stüben: FU Berlin

19.–23.02.2001 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Lehrveranstaltung, mit Alexander Reinefeld und Wolfgang Baumann)

Hinnerk Stüben: RRZN Hannover

16.–18.07.2001 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Kurs, mit Wolfgang Baumann)

Stefan Zachow: TU Berlin

WS 00/01 *Computer Assisted Surgery* (Vorlesung, mit Heinz U. Lemke)

7.3 Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

Hubert Busch

25.–26.10.2001 *Arbeitskreis Supercomputing*, Zentrum für Kommunikation und Information (ZKI), ZIB

Peter Deuffhard

19.01.2001 *DBU–Statusseminar “Kopplung von thermischer Gebäudesimulation und Raumluftströmungssimulation mit CAAD-Programmen über den IFC-Standard zur energetischen Gebäudeoptimierung”*, ZIB (gemeinsam mit TU Berlin)

02.–06.09.2001 *First EMS–SIAM Conference “Applied Mathematics in Our Changing World”*, ZIB (gemeinsam mit R. Jeltsch (ETH), J. Strang (MIT))

Hans-Hermann Frese

21.–25.05.2001 *CUG SUMMIT 2001: A Space Odyssey, 43rd CUG Conference*, India Wells, CA, USA

Karin Gatermann

20.–25.08.2001 *3rd ISAAC Congress*, Berlin

Martin Grötschel

14.–15.05.2001 *CEIC Meeting*, Princeton, New Jersey, USA

08.–10.06.2001 *BMS–DMV Meeting*, Liège, Belgien

Winfried Neun

22.–25.07.2001 *Publicity Chair des „International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation“*, University of Western Ontario, London, Ontario, Kanada

06.–07.08.2001 *Berlin meeting des „Esprit Thematic Network – OpenMath“*, ZIB, Berlin

Jörg Rambau

13.–15.09.2001 *Abschlußkolloquium des DFG-Schwerpunktprogramms „Echtzeitoptimierung großer Systeme“*, Berlin

Alexander Reinefeld

15.–18.05.2001 *CCGrid2001: IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid*, Brisbane, Australien

10.–15.06.2001 *Seminar Management of Metacomputers*, (Ko-Organisator mit Uwe Schwiegelshohn, Dortmund), Schloß Dagstuhl, Saarbrücken

18.–22.06.2001 *Euroglobus Workshop*, Lecce, Italien (Mitglied des Steering Committees)

28.–31.08.2001 *Euro-Par 2001: European Conference on Parallel Computing*, Manchester, Großbritannien, Global chair des Topics „Meta- und Grid-Computing“

07.–10.10.2001 *3rd Global Grid Forum*, Rom, Italien

Marc Steinbach

25.–31.08.2001 *9th International Conference on Stochastic Programming*, Berlin

Thomas Steinke

21.–23.06.2000 *International Supercomputer Conference 2001*, Distributed Applications for Life Sciences: BLAST Portal and UNICHEM at ZIB

Hinnerk Stüben

19.–24.08.2001 *Lattice 2001: The XIX International Symposium on Lattice Field Theory*, Humboldt-Universität zu Berlin

Renate Weidinger

19.–20.11.2001 *DFN-Symposium: Fortgeschrittene Kommunikation*, ZIB

TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

8.1 Gastvorträge

- 11.01.2001** Jürg Kramer (HU Berlin):
Die Vermutung von Birch–Swinerton–Dyer
- 11.01.2001** Ruedi Seiler (TU Berlin):
Die Navier–Stokes–Gleichungen
- 19.01.2001** Roland Koenigsdorf (Fachhochschule Biberach):
Eingang der thermischen Gebäude- und Raumluftrömungssimulation mit CAAD-Programmen
- 19.01.2001** Markus Rösler (Technische Universität Dresden):
Gekoppelte Gebäude-, Anlagen-, und Strömungssimulation — Stand der Entwicklung an der TU Dresden
- 19.01.2001** Fritz Schmidt (Universität Stuttgart):
Das Visual Energy Center — ein zeitgemässer Ansatz zur energetischen Optimierung von Gebäuden und ihren technischen Anlagen
- 19.01.2001** Christoph Van Treeck (Technische Universität München):
Eingang der thermischen Gebäudesimulation in die Planungspraxis und Normung
- 29.01.2001** Thomas Sturm (Universität Passau):
Solving Linear Systems of Congruences
- 02.02.2001** Vincenzo Capasso (MIRIAM, University of Milan, Italien):
The Mathematics of Polymers' Crystallization
- 06.02.2001** Wolfgang Dahmen (IGPM, RWTH Aachen):
Wavelets and Adaptivity
- 04.05.2001** Folkmar Bornemann (Technische Universität München):
Schnelle Löser für Variationsprobleme der Bildsegmentierung
- 05.06.2001** Dr. Michael Cohen (Microsoft Research, Redmont, WA, USA):
Revealing a Bit of What We Miss
- 14.06.2001** Dietrich Burde (Universität Düsseldorf):
Anwendungen von Gröbner–Basen auf Probleme aus Algebra und Zahlentheorie

- 21.06.2001** Javier Marengo (Universidad de Buenos Aires, Argentinien):
Scheduling Polytopes Coming from the Bandwidth Allocation in Point-to-Multipoint Radio Access Systems
- 29.06.2001** Burkhard Monien (Universität Paderborn):
Lastverteilungsverfahren und das Spektrum der Laplace-Matrix
- 30.08.2001** Sascha Georg Lukac (University of Liverpool, U.K.):
Die Homfly-Knoteninvariante
- 26.11.2001** Dr. Dirk Bartz (Universität Tübingen - Wilhelm-Schickard-Institut für Informatik):
Efficient Occlusion Culling for Large Polygonal Models
- 03.12.2001** James Scott (University of Cambridge, U.K.):
Stochastic programme decomposition techniques for finance and logistics

8.2 Gastaufenthalte

- Andreas Gerber** (Fachhochschule Biberach)
18.–19.01.2001
- Tobias Schrag** (Fira. Dezentral-Bayern, Riegsee)
18.–19.01.2001
- Alf Perschk** (Technische Universität Dresden)
18.–19.01.2001
- Thomas Sturm** (Universität Passau)
26.–31.01.2001
- Pavel Solin** (Johannes Kepler University, Linz, Österreich)
28.–29.01.2001
- Stan van Hoesel** (Universiteit Maastricht, Niederlande)
02.–06.02.2001
- Carlo Mannino** (Università di Roma „La Sapienza“, Rom, Italien)
02.–06.02.2001
- Josef Dorfmeister** (TU München)
12.02.–31.03.2001
- Uwe Harms** (Harms Supercomputing-Consulting, München)
14.02.2001
- Marcus Weber** (damals Paderborn)
19.02.2001
- Olof Barring** (IT/PDP, CERN, Genf, Schweiz)
26.02.2001

- John Towns** (Division Director Scientific Computing, NCSA, Illinois, USA)
01.–04.03.2001
- Pekka Pietikainen** (CERN, Genf, Schweiz)
17.–19.03.2001
- Péter Fige** (Eötvös Lorand University Budapest, Ungarn)
01.–30.04.2001
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG, Düsseldorf)
10.04.2001
- Dr. Michael Cohen** (Microsoft Research Graphics Group, Redmont, WA)
18.04.–15.06.2001
- Amin Coja-Oghlan** (Hamburg)
23.04.2001
- Thomas Wolf** (School of Mathematical Sciences, Queen Mary, University of London,
U.K.)
07.–09.05.2001
- Frank van den Eijkhof** (Universiteit Utrecht, Niederlande)
14.–18.05.2001
- Eric Brisson** (ILOG, Mountain View, USA)
08.–13.06.2001
- Bob Bixby** (ILOG, Houston, USA)
08.–13.06.2001
- Jean-Christophe Jardinier** (ILOG Telecoms & Media, Madrid, Spanien)
11.06.2001
- Dietrich Burde** (Universität Düsseldorf)
14.06.2001
- Javier Marengo** (Universidad de Buenos Aires, Argentinien)
18.06.–17.07.2001
- Wolfram Büttner** (Siemens AG, München)
24.–26.06.2001
- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques, EPFL, Lausanne, Schweiz)
24.–26.06.2001
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
24.–26.06.2001
- Joachim Römel** (Bayer AG, Leverkusen)
24.–26.06.2001
- Horst Simon** (NERSC, Lawrence Brekeley National Laboratory, Berkeley, USA)
24.–26.06.2001

Ehrhard Winter (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)

24.–26.06.2001

Özenç Atça (Middle East Technical University, Ankara)

01.07.–14.09.2001

Mert Özarar (Middle East Technical University, Ankara)

01.08.–14.09.2001

Sascha Georg Lukac (damals University of Liverpool, U.K.)

30.08.2001

S.S. Ravi (State University of New York at Albany, USA)

23.08.–26.08.2001

Miguel F. Anjos (Universität zu Köln)

19.–21.09.2001

Manfred Padberg (New York University, USA)

11.–13.10.2001

Thomas Wolf (Brock University, St. Catharines, Ontario, Kanada und ZIB-Fellow)

07.–10.11.2001

Luigi Laura (Università di Roma „La Sapienza“, Italien)

21.11.–05.12.2001

Willem de Paepe (Technische Universiteit Eindhoven, Niederlande)

21.11.–05.12.2001

James Scott (University of Cambridge, U.K.)

02.–07.12.2001

8.3 Tagungen und Veranstaltungen

16.01.2001 Besuch von Studenten der FHTW Berlin (Prof. Fortenbacher)

Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz

17.01.2001 Besuch von Studenten der Informatik, Universität Potsdam (Prof. Schnor)

Veranstalter: Hubert Busch, Ralf Götz, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

28.03.2001 Besuch von Studenten der Mathematik an der Universität Osnabrück

Veranstalter: Hubert Busch, Ralf Götz, Ulrich Nowak, Thomas Steinke

11.05.2001 Symposium “60 Jahre Computer Geschichte – die Rechenmaschine von

Konrad Zuse (1941–2001)” (Veranstalter: TU Berlin, FU Berlin, ZIB)

18.05.2001 Besuch von Studenten der TFH Wildau

Veranstalter: Ralf Götz, Ulrich Nowak, Thomas Steinke

- 01.06.2001** Besuch von Bibliothekaren und Informationstechnikern der Tschechischen Nationalbibliothek Prag in der KOBV-Zentrale
Veranstalter: Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger
- 13.06.2001** Präsentation des Bibliothekssystems 'Alephino' durch die Firma Ex Libris GmbH
Gemeinsame Veranstaltung der KOBV-Zentrale und der ZIB-Bibliothek im ZIB;
- 18.06.2001** Präsentation von SISIS-Elektra durch die Firma Sisis GmbH
KOBV-Veranstaltung im ZIB; Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 03.07.2001** Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB (Prof. Fortenbacher)
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 15.09.2001** Vorträge und Führungen durch den Rechnerraum anlässlich der "Langen Nacht der Wissenschaften"
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Ralf Götz, Wolfgang Häusler, Thomas Steinke, Hinnerk Stüben
- 05.–07.10.2001** Workshop „Future Research in Combinatorial Optimization“. Veranstalter: Sven O. Krumke, Arie Koster, Diana Poensgen und Adrian Zymolka
- 11.–13.10.2001** Workshop „The sharpest cut“ in honor of Manfred Padberg on occasion of his 60th birthday
Veranstalter: Martin Grötschel, Annegret Wagler
- 22.10.–24.10.2001** Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund
Veranstaltung in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde. (Programm und Kurzbericht unter <http://www.museumsbund.de>)
- 23.10.2001** 1. KOBV-Forum
KOBV-Veranstaltung im ZIB; Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 22.–23.11.2001** Workshop 'Analysis of Micro-Vascular Networks'

8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 22.–28.03.2001** CeBit 2001, Hannover:
Optimierung in der Telekommunikation: Präsentation verschiedener Netzwerkoptimierungstools (Bley, Eisenblätter, Koster, Wessäly, Zymolka)
- 02.–05.04.2001** 91. Deutscher Bibliothekartag "Bibliotheken – Portale zum globalen Wissen" in Bielefeld:
Demonstration der KOBV-Suchmaschine – Version 2: Hildegard Franck, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Dagmar Otto, Beate Rusch
- 19.–20.09.2001** Sun Summit Digitale Bibliotheken 2001 in München:
Demonstration der KOBV-Suchmaschine: Hildegard Franck, Beate Rusch

05.10.2001 Informationsgespräch der KOBV-Bibliotheksdirektoren im ZIB:

Präsentation der Linking-Software SFX: Dagmar Otto

15.–17.10.2001 12th Annual ICAU Meeting in Thessaloniki:

Poster Session / Powerpoint Presentation of the KOBV Search Engine – Version 2: Monika Lill, Stefan Lohrum

8.5 Mathematik in die Schule

Das ZIB und seine Arbeitsbereiche erfreuen sich seit Jahren eines ständig steigenden Interesses bei Schüler- und Studentengruppen. Dies zeigt die Vielzahl von Führungs- und Vortragsveranstaltungen, die von Mitarbeitern des ZIB sowohl im Haus als auch extern durchgeführt werden.

Der Interessenschwerpunkt des Publikums liegt dabei auf den Anwendungen der Mathematik einerseits und der Informationstechnik bzw. den Hochleistungsrechnern andererseits. An beispielhaften Projekten werden mathematische Methoden, ihre Umsetzung in spezielle Algorithmen und die Bearbeitung auf Rechnern der verschiedenen Leistungsklassen demonstriert. Während Rechner und Informatik auf ohnehin vorhandenes breites Interesse bei Schülern und Studenten stoßen, ist der Einsatzbereich der Mathematik nicht immer offensichtlich. Die Veranstaltungen tragen zur Aufklärung darüber bei, in welchen Bereichen und mit welchen Methoden die Mathematik überall eine Rolle spielt.

Herausragende Veranstaltung im Jahr 2001 war die Beteiligung des ZIB mit zwei Präsentationen an der „Langen Nacht der Wissenschaften“. Geboten wurden 3D-Wissenschaftskino mit Visualisierungen aus naturwissenschaftlichen und medizinischen Anwendungsprojekten des ZIB sowie Führungen zur Besichtigung der Hochleistungsrechner. Insgesamt waren etwa 1000 Personen im ZIB, von denen ca. 350 Personen an den Supercomputerführungen teilnahmen, obwohl teilweise längere Wartezeiten in Kauf genommen werden mussten, da die Führungen aus Sicherheitsgründen nur in Kleingruppen stattfinden konnten.

Weitere Führungsveranstaltungen wurden mit auf die jeweiligen Interessen der Schüler- und Studentengruppen abgestimmten Themen durchgeführt. Hier standen einerseits aktuelle Forschungsarbeiten aus den Bereichen Angewandte Mathematik und Informatik im Vordergrund, andererseits aber natürlich auch die konkreten Systeme in Rechner- und Datenraum mit den roboterbedienten Bandsilos.

21.02.2001 Besuch von Schülern der Lily-Braun-Oberschule, Berlin-Spandau

Veranstalter: Ralf Götz, Martin Grötschel, Diana Poengen, Wilhelm Vortisch

24.04.2001 Besuch von Schülern der Humboldt-Schule, Berlin

Veranstalter: Ralf Götz

- 24.05.2001** Besuch von Schülern des Canisius-Kolleg, Berlin
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 29.05.2001** Schüler des Albert-Schweitzer-Gymnasiums, Erfurt
Hyperthermie, Veranstalter: Martin Seebaß
- 09.07.2001** Besuch von Schülern der Herder-Oberschule, Berlin
Hyperthermie, Veranstalter: Peter Deuffhard, Ralf Götz, Jörg Rambau, Martin Seebaß, Hans Lamecker, Thomas Steinke, Malte Zöckler
- 26.09.2001** Besuch einer Schülergruppe im Rahmen eines FU-Seminars
3D-Kino — Reise durch die Dimensionen,
Veranstalter: Daniel Baum, André Merzky, Olaf Paetsch
- 26.09.2001** Besuch von Teilnehmern eines Schülerseminars (Volker Schulze, FB Mathematik der FU Berlin)
Veranstalter: Daniel Baum, Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Ralf Götz, André Merzky, Olaf Paetsch
- 30.10.2001** 3D-Kino — Reise durch die Dimensionen
Stefan Felsner, FB Informatik, FU Berlin mit einer Schülergruppe aus Dresden,
Veranstalter: Stefan Zachow, André Merzky, Tino Weinkauf
- 30.10.2001** Besuch von Teilnehmern eines Schülerseminars (Stefan Felsner, FB Informatik der FU Berlin)
Veranstalter: Daniel Baum, Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Ralf Götz, André Merzky, Olaf Paetsch

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 2001 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Gerhard Braun, FUB
- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, stellvertretender Vorsitzender
- StS Dr. Josef Lange, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — bis 19.06.2001
Koordinator für den Bereich Wissenschaft und Forschung Dr. Bernd Köppl, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — ab 26.06.2001
- 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 25. Januar und 11. Juli 2001.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. 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 Beirates².

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. Alfred Louis | – Universität des Saarlandes,
Saarbrücken
Sprecher des Beirates |
| Prof. Dr. Wolfram Büttner | – Siemens AG, München |
| Prof. Dr. Hanns-Jürgen Lichtfuß | – Technologiestiftung Berlin, Berlin |
| Prof. Dr. Thomas Liebling | – Ecole Polytechnique
Fédérale de Lausanne,
Lausanne-Ecublens, Schweiz |
| Dr. Joachim Römelt | – Bayer AG, Leverkusen |
| Prof. Dr. Karl-Victor von Schöning | – Inpro GmbH, Berlin |
| Dr. Horst D. Simon | – NERSC, Lawrence Berkeley National
Laboratory, Berkeley, USA |
| Dr.-Ing. Erhard Winter | – E-Plus Mobilfunk GmbH,
Düsseldorf |

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 25./26. Juni 2001 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group

²<http://www.zib.de/org/satzung/index.de.html>

2. DFN — Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V.
3. DMV — Deutsche Mathematiker-Vereinigung e.V.
4. ECMI — European Consortium for Mathematics in Industry
5. FAV — Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
6. Forum für Zukunftsenergien
7. Konrad-Zuse-Gesellschaft
8. NAG Users Association
9. SIAM — Society for Industrial and Applied Mathematics
10. UNICORE Forum e.V.
11. ZKI — Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.

9.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2001 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Thomas Wolf (University of London/Brock University, Kanada)
Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen; symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie
- Dr. Reinhard Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg)
Mathematische Multiskalen — Modellierung in der Neurobiologie
- Seit März 2002 ist ZIB-Fellow
Prof. Dr. Christoph Helmberg (Universität Kaiserslautern)
Bündelverfahren für Kombinatorische Optimierungsprobleme

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 2001 wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)
Wolfgang Dalitz
Marlies Engelke
Bodo Erdmann
Klaus Jacobsen
Gabriele Kempf
Dirk Krickel

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die zu Beginn des Jahres 2002 besonders deutlich gewordenen finanziellen Schwierigkeiten des Landes Berlin geprägt — ein Zustand, der immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausstattung zu 100% vom Land finanzierten Einrichtung zu beeinträchtigen droht. Da zudem die Drittmiteinnahmen stagnieren bzw. in bestimmten Teilbereichen wie z.B. der Telekommunikation einbrechen, sind die finanziellen Ausblicke wenig erfreulich.

Der Zuschuß des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2001 in der "Tradition" der vergangenen Jahre erneut gekürzt worden — für die Jahre 2002 und 2003 sind weitere Kürzungen zu erwarten. Für die entscheidungsreifen *investiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnte die Beschaffung des HLRN-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 40 Millionen DM in den Jahren 2001 bis 2003 eingeleitet und erfolgreich abgeschlossen werden. Das System wird im II. Quartal 2002 den Betrieb aufnehmen.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2001 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 28.911 TDM; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 22.073 TDM und auf Investitionen 6.838 TDM.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuß von 13.855 TDM. Die eigenen Erträge, insbesondere aus Kooperationen und Drittmittelprojekten, waren mit 7.188 TDM veranschlagt. Die Höhe der Drittmiteinnahmen ist — vor Aufstellung des Jahresabschlusses — mit 5.879 TDM anzusetzen. Ein positiver Jahresabschluß 2001 — mit einer Überschubbildung aufgrund der verzögerten Inbetriebnahme des Landeshochleistungsrechners und einer erhöhten Ertragswirksamkeit der im Berichtsjahr ausgelaufenen mehrjährigen Drittmittelprojekte — ist zu erwarten.

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.

	Drittmiteleinahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Sonstige Einnahmen TDM	Einnahmen insgesamt TDM
	Wirtschaft/ Industrie	öffentliche Mittel	insgesamt	konsumentiv	investiv		
	TDM	TDM	TDM	TDM	TDM		
1993	716	802	1.518	8.098	2.162	141	11.919
1994	1.779	1.713	3.492	8.302	16.244	153	28.191
1995	2.563	1.173	3.736	9.155	7.834	100	20.825
1996	2.285	1.477	3.762	9.511	1.000	98	14.371
1997	2.501	2.601	5.102	15.173 ³	800	237	21.312
1998	1.680	3.766	5.446	14.835	850	99	21.230
1999	2.108	3.409	5.517	14.848 ⁴	4.330	192	24.890
2000	2.893	3.738	6.631	14.126	1.051	300	22.108
2001 ⁵	1.695	4.184	5.879	13.855	2.849	250	22.833

Tabelle 9.1: Einnahmen in den Jahren 1993 – 2001 (TDM)

³Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

⁴Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

⁵voraussichtliches Ist 2001 – vor Aufstellung des Jahresabschlusses

Die Entwicklung der Drittmiteinnahmen — Angaben in EURO — lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

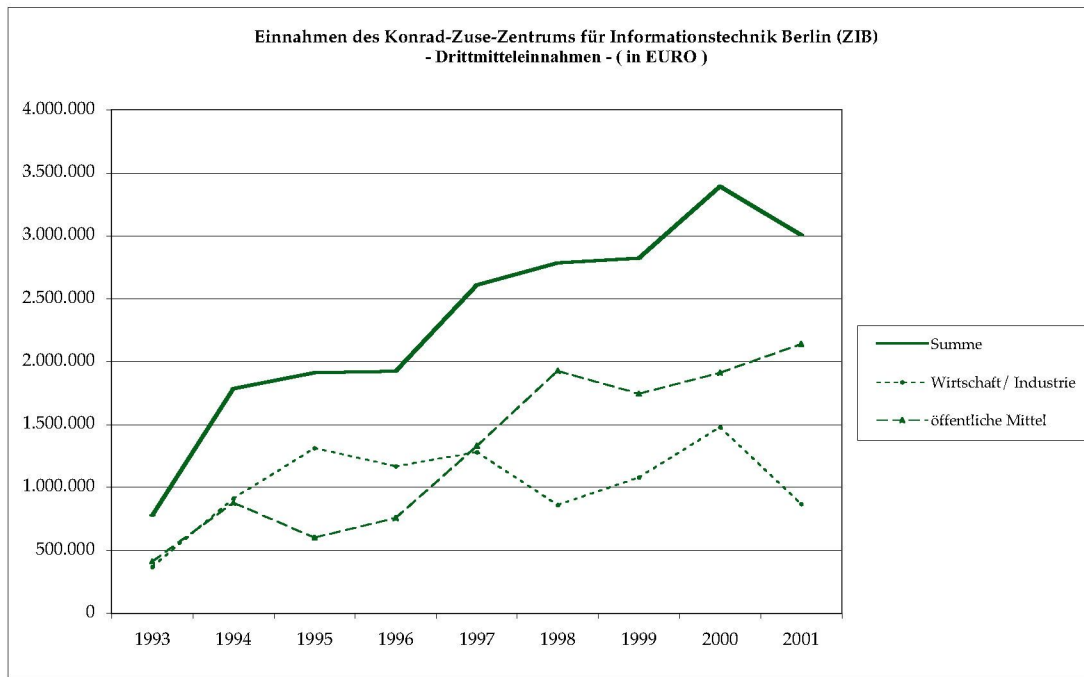


ABBILDUNG 9.1: Drittmiteinnahmen in EURO

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (84,5 Stellen, — 6 Beamten- und 78,5 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. Der Zuwachs gegenüber dem Vorjahr ergibt sich aus der Institutionalisation des KOBV am ZIB (plus 7 Stellen). Der Aufwand für diese Stellen wird vollständig durch Erträge in gleicher Höhe ausfinanziert. Durch die vollständige Finanzierung der Stellen mit Wegfallvermerk aus Eigenmitteln des ZIB sowie der deutlich über dem Durchschnitt liegenden Altersstruktur der unbefristet beschäftigten Belegschaft besteht im Personalhaushalt ein ständiges Defizit, das bisher durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmiteinnahmen ausgeglichen werden konnte.

Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.2001	01.01.2002
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	78	84
Datenverarbeitung/Technik	24	26
Verwaltung/Bibliothek	16	20
Studentische Hilfskräfte	41	39
Insgesamt	163	173

ABBILDUNG 9.2: Zahl der Beschäftigten

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2002 insgesamt 95 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 76 Beschäftigte finanziert.

KAPITEL 10

ANSPRECHPARTNER

Präsident:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard Inhaber des Lehrstuhls <i>Scientific Computing</i> am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin Tel. (030) 841 85 – 101	
Vizepräsident:	Prof. Dr. Martin Grötschel Inhaber des Lehrstuhls <i>Diskrete Mathematik</i> am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität Berlin Tel. (030) 841 85 – 210	
Bereichsleiter Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld Inhaber des Lehrstuhls <i>Praktische Informatik</i> am Institut für In- formatik der Humboldt–Universität zu Berlin Tel. (030) 841 85 – 130	
Bereichsleiter Verwaltung:	Henry Thieme Tel. (030) 841 85 – 100	
Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard/ Dr. Martin Weiser	841 85–101 841 85–170
Wissenschaftliche Software:	Dr. Ulrich Nowak	841 85–175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans–Christian Hege	841 85–141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ Dr. Jörg Rambau	841 85–210 841 85–249
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85–173
Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	841 85–130
Höchstleistungsrechner:	Hubert Busch	841 85–135
Interne Rechenzentrumsdienste:	Wolfgang Pyszkalski	841 85–152
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