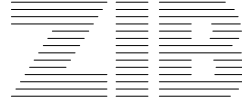


---

Konrad-Zuse-Zentrum  
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7  
D-14195 Berlin-Dahlem  
Germany

# **Jahresbericht 2002**





## VORWORT

Wie in den vergangenen Jahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz *Zuse-Institut Berlin (ZIB)*, auch nach Ablauf des Jahres 2002 seinen Freunden, Gönnern und allen Interessierten aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Jahresbericht vor.

Im Mai 2002 erhielt Berlin endlich den Zuschlag für das *DFG-Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse"*, das von den fünf Institutionen TU, FU, HU, WIAS und ZIB getragen wird. Die wichtige Rolle des ZIB in fachlicher, organisatorischer und personeller Hinsicht ist nach außen wie nach innen klar sichtbar. Leider hatte Berlin auch einen Preis zu zahlen: der exzellent begutachtete SFB-Antrag (SFB 1946, Sprecheruniversität FU) in Richtung Klima-, Umwelt- und Lebenswissenschaften, bei dem auch das ZIB maßgeblich beteiligt war, wurde von der DFG aus von uns nur schwer nachvollziehbaren Gründen abgelehnt; deren wichtigster war, daß man uns nicht zugetraut hat, in Berlin neben dem DFG-Forschungszentrum einen weiteren Forschungsschwerpunkt erfolgreich auf- und ausbauen zu können — wohlgerne: in Mathematik für Klima- und Umweltwissenschaften, nicht für Schlüsseltechnologien! Wir glauben natürlich nicht, daß da etwa föderaler oder disziplinärer oder gar kollegialer Neid im Spiel war.

Mit der Inbetriebnahme des *Hochleistungsrechners Nord (HLRN)* ging im Sommer 2002 für unsere Supercomputer-Nutzer endlich ein lang gehegter Wunsch in Erfüllung. Der IBM-Rechner führt pro Sekunde vier Billionen Operationen aus (4 TeraFlops) und gehört damit zu den fünfzig leistungsfähigsten Supercomputern weltweit. Mehr noch als die Rechenleistung beeindruckt aber der Kraftakt der sechs Bundesländer, die im HLRN-Verbund die Investitionskosten von ca. 20 Mio Euro gemeinsam geschultert haben, wovon auf Berlin nur 2,2 Mio Euro entfallen. Auch das Betriebskonzept stellt eine Novität dar: Der Supercomputer wird zu gleichen Teilen am ZIB/Berlin und am RRZN/Hannover betrieben und den Nutzern über eine einheitliche Zugangssoftware als ein System zur Verfügung gestellt. Eine dedizierte Netzwerkverbindung zwischen den beiden Standorten ermöglicht erstmals Grid Computing auf Hochleistungsrechnern.

Im Berichtszeitraum erzielten wir besonders hohe *Drittmiteleinahmen* — nach unserer eigenen Einschätzung ein einmaliger Höhepunkt, da sich neu anlaufende und auslaufende Projekte in 2002 gerade akkumuliert hatten. In diesen finanziell düren Zeiten tut dennoch der Drittmittelregen der Forschungssaat ausgesprochen gut. Über die Details unserer *Forschungsaktivitäten* legt dieser Bericht im Einzelnen ausführlich

Zeugnis ab, nach fachlichen Schwerpunktthemen getrennt. Wie auch in den Jahren zuvor sind auch 2002 wieder eine Reihe von *Rufen* und *Auszeichnungen* an Mitglieder des ZIB ergangen.

Der *Wissenschaftliche Beirat* des ZIB tagte am 28. Mai 2002. Gerne zitieren wir aus seiner zusammenfassenden Bewertung: "Das ZIB hat auch in diesem Berichtszeitraum seine international führende Rolle nachhaltig bestätigt und gefestigt. Die Vernetzung des ZIB mit den Berliner Forschungseinrichtungen ist durch die Vergabe des DFG-Forschungszentrums eindrucksvoll bestätigt." Und, damit wir nicht nachlassen, noch die Schluß-Coda: "Weiter so!" Dieser Aufforderung wollen wir gerne nachkommen.

Allerdings ist, zum Zeitpunkt der Abfassung dieses Jahresberichtes, immer noch nicht ausreichend klar, wie die politisch Verantwortlichen des Landes Berlin mit uns als Forschungsinstitut umzugehen gedenken; der Satz in der SPD/PDS-Kooperationsvereinbarung: "Das ZIB soll in eine Bund-Länder-Finanzierung überführt werden" tickt wie eine Zeitbombe. Erste Erfahrungen der Politiker im Umgang mit der Schließung der FU-Medizin liegen seit einigen Monaten vor. Es bleibt abzuwarten, ob sie die Finanzpolitiker dieser Stadt zu weiteren Kahlschlägen ermutigen oder den Einsichtigen, soweit sie politisch überhaupt noch etwas zu sagen haben, mehr Freiraum für Vorsicht und Umsicht eröffnen. Glücklicherweise sind wir in dieser Lage nicht allein. Deshalb haben wir uns mit zahlreichen anderen außeruniversitären Forschungsinstituten Berlins und Brandenburgs in der Initiative "WissenSchafftZukunft" zusammengeschlossen, deren Sprecherkreis der Unterzeichner angehört. Credo dieser Initiative ist: Was, wenn nicht Kultur und Wissenschaft, hätte denn Berlin mittel- und langfristig als Einnahmequellen zu bieten? Diese Einsicht wird von fast allen politischen Entscheidungsträgern verbal geteilt. Ihre finanzielle oder strukturelle Konsequenz scheint jedoch politisch nicht opportun oder noch nicht opportun oder bleibt, wie aktuell zu befürchten ist, sogar ganz aus.

Aus Sicht des ZIB gilt deshalb zusammenfassend: Wir waren zwar noch nie so erfolgreich wie zur Zeit, aber auch noch nie so in unserer Zukunft bedroht.

Berlin, im Mai 2003



Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuflhard  
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

<b>1</b>	<b>Das ZIB — Struktur und Ziele</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Forschung und Entwicklung</b>	<b>12</b>
2.1	Überblick . . . . .	12
2.2	Schwerpunkte . . . . .	23
2.2.1	Molekulare Konformationsdynamik . . . . .	23
2.2.2	Integrierte Optik . . . . .	31
2.2.3	Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle . . . . .	36
2.2.4	Computergestützte Therapie- und Operationsplanung . . . . .	45
2.2.5	Biomedizinische Bildverarbeitung . . . . .	52
2.2.6	Virtuelle Labors . . . . .	56
2.2.7	Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung . . . . .	73
2.2.8	Diskrete Strukturen . . . . .	78
2.2.9	Telekommunikation . . . . .	89
2.2.10	Ganzzahlige Optimierung . . . . .	99
2.2.11	Online-Optimierung . . . . .	104
2.2.12	Verkehr . . . . .	111
2.2.13	Grid Computing . . . . .	118
2.2.14	Cluster Computing und Anwendungen . . . . .	125
2.3	Auszeichnungen und Rufe . . . . .	129
<b>3</b>	<b>Wissenschaftliche Dienstleistungen</b>	<b>131</b>
3.1	Überblick . . . . .	131
3.2	Schwerpunkte . . . . .	134
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	134
3.2.2	Math-Net – ein verteiltes Informationssystem für die Mathematik	138
3.2.3	Math&Industry - Anwendungen der Mathematik im Web . . .	140
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen . . . . .	142

---

3.2.5	REDUCE . . . . .	144
<b>4</b>	<b>Supercomputing und Netze</b>	<b>146</b>
4.1	Hochleistungsrechner am ZIB . . . . .	146
4.1.1	Hochleistungsrechner Nord (HLRN) . . . . .	146
4.1.2	Systemkonfiguration und Software-Ausstattung . . . . .	147
4.1.3	Ausgewählte Großprojekte . . . . .	150
4.2	Fachberatung . . . . .	163
4.2.1	Chemie und Bioinformatik . . . . .	164
4.2.2	Geowissenschaften . . . . .	165
4.2.3	Ingenieurwissenschaften . . . . .	166
4.2.4	Physik . . . . .	167
4.3	Weitverkehrsnetze . . . . .	168
4.3.1	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN . . . . .	168
4.3.2	BRAIN-Dienste . . . . .	169
4.3.3	HLRN-Link Berlin-Hannover . . . . .	170
<b>5</b>	<b>Publikationen</b>	<b>173</b>
5.1	Preprints . . . . .	173
5.2	Mitherausgabe von Publikationen . . . . .	192
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden . . . . .	193
5.4	Monographien . . . . .	200
5.5	Habilitationen . . . . .	201
5.6	Dissertationen . . . . .	201
5.7	Diplomarbeiten . . . . .	201
<b>6</b>	<b>Produkte</b>	<b>203</b>
6.1	CodeLib . . . . .	203
6.2	Amira . . . . .	203
6.3	HyperPlan . . . . .	204
6.4	DOC++ . . . . .	204
6.5	iTe . . . . .	204
6.6	VTL . . . . .	205
6.7	SoPlex . . . . .	205

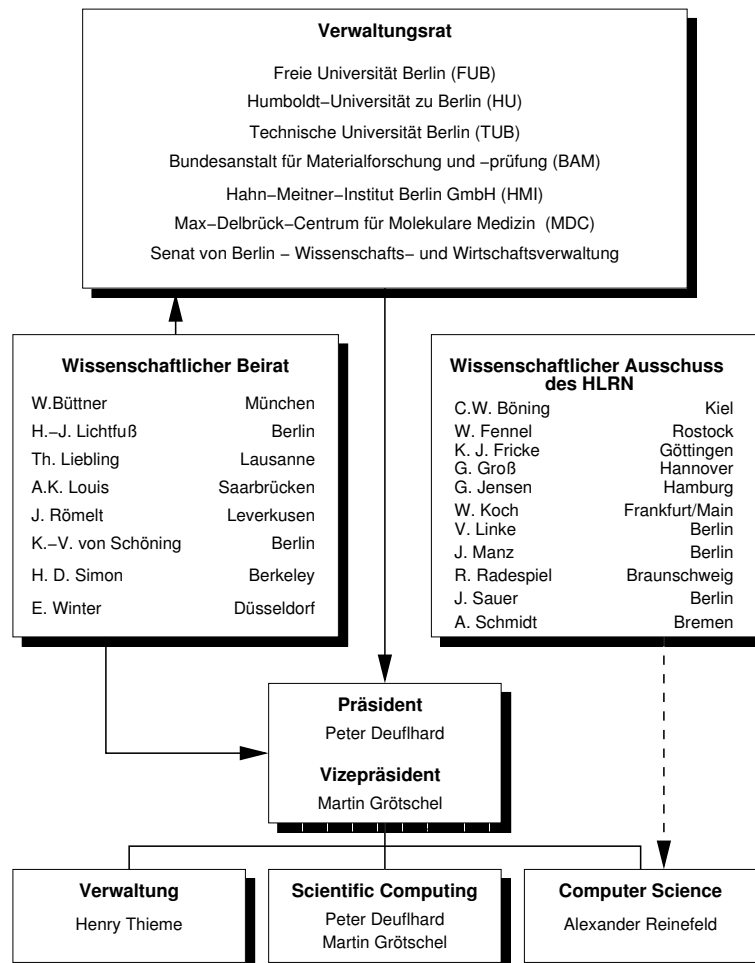
6.8	Verfahren aus der Computeralgebra . . . . .	205
6.9	DISCNET . . . . .	208
6.10	Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale . . . . .	208
6.11	Math-Net Informationsserver . . . . .	211
6.12	Informationsdienste des eLib-Servers . . . . .	211
6.13	GOS – Datenbank für kulturgeschichtliche Daten . . . . .	212
6.14	Idasim - Simulator für Speicherhierarchien . . . . .	212
<b>7</b>	<b>Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern</b>	<b>213</b>
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte . . . . .	213
7.2	Vorlesungen und Seminare . . . . .	236
7.3	Mitveranstalter auswärtiger Tagungen . . . . .	239
<b>8</b>	<b>Tagungen und Gäste am ZIB</b>	<b>241</b>
8.1	Gastvorträge . . . . .	241
8.2	Gastaufenthalte . . . . .	242
8.3	Tagungen und Veranstaltungen . . . . .	244
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen . . . . .	244
8.5	Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit . . . . .	245
<b>9</b>	<b>Organisatorisches</b>	<b>248</b>
9.1	Organe . . . . .	248
9.2	Satzung . . . . .	249
9.3	Wissenschaftlicher Beirat . . . . .	249
9.4	Mitgliedschaften . . . . .	250
9.5	ZIB-Fellows . . . . .	250
9.6	Selbstverwaltung . . . . .	250
9.7	Wirtschaftliche Situation . . . . .	251
9.8	Personelle Entwicklung . . . . .	253
<b>10</b>	<b>Ansprechpartner</b>	<b>255</b>



## KAPITEL 1

# DAS ZIB — STRUKTUR UND ZIELE

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



## **Forschung und Entwicklung**

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.

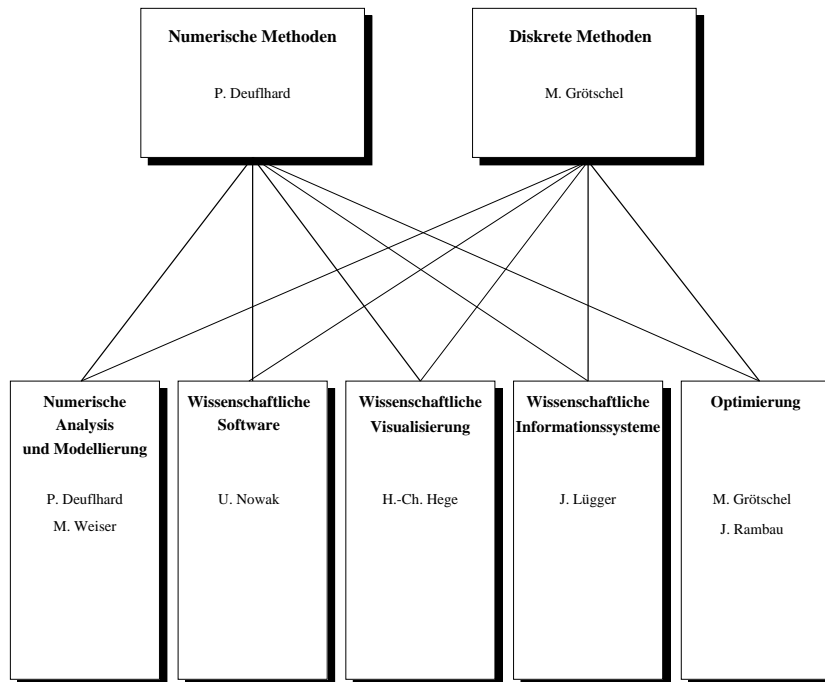
## **Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen**

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. Das ZIB ist zudem eine von fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse" tragen.

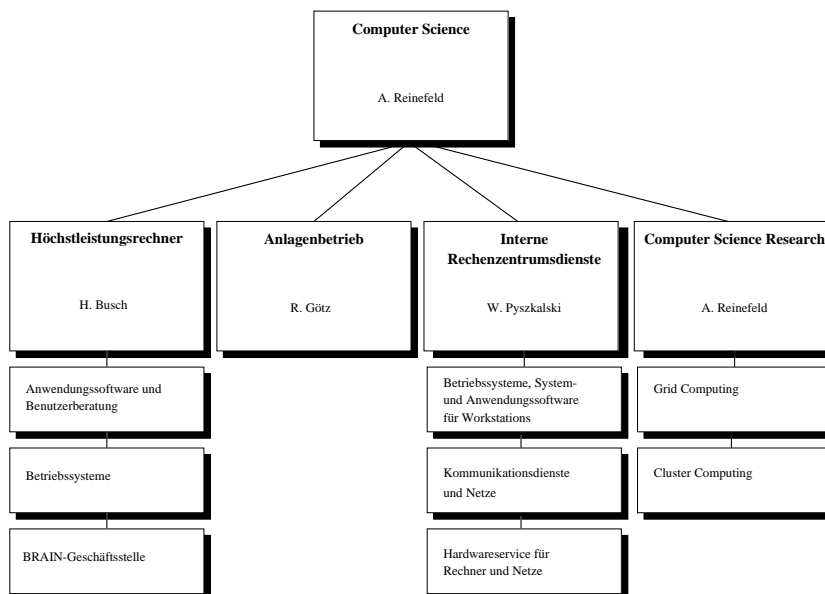
## **Supercomputing als Dienstleistung**

Das ZIB betreibt Höchstleistungsrechner (sogenannte Supercomputer; das derzeit noch installierte T3E-System des Herstellers SGI/CRAY wird in diesen Monaten durch ein IBM-System "Series 690 mit jeweils 384 Prozessoren" an den HLRN-Standorten Berlin und Hannover 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. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind chemische Verfahrenstechnik, Medizintechnik und Neurobiologie. 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)” und “Informationstechnische Werkzeuge für Museen” sowie 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 Landeshochleistungsrechner sowie die fachliche Beratung der Anwender zur effizienten Nutzung

der Systeme, insbesondere bei Neuentwicklungen und Anpassungen der Codes an die spezifischen Eigenschaften der im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) betriebenen Systeme. Weitere Arbeitsschwerpunkte dieser Abteilung liegen im Bereich Weitverkehrskommunikationsnetze, z.B. Koordination des Berliner Wissenschaftsnetzes BRAIN, sowie in der Betreuung des Wissenschaftlichen Ausschusses 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.

*Abteilung 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. Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

- Molekulare Konformationsdynamik
- Optimale Steuerung
- Virtuelle Labore

bearbeitet. Der im Vorjahr noch gesondert genannte Schwerpunkt “Adaptive Multilevel-FEM” ist inzwischen in eine Reihe von Einzelprojekten eingesickert. Aus 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 in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Ch. Schütte (FU, Mathematik) im Rahmen einer gemeinsamen Campus-Arbeitsgruppe “Moleküldynamik” bearbeitet. Ziel ist, nach wie vor, der Entwurf von Medikamenten auf der mathematischen Basis der *Konformationsanalyse*. Alle Anstrengungen richten sich weiterhin auf die Beherrschung immer größerer Moleküle.

Kritischer Zwischenschritt der Algorithmen ist die Diskretisierung des stochastischen Übergangsoperators mittels adaptiver Raumbboxen, so daß der gefürchtete “Fluch der Dimension” vermieden wird. Im Berichtszeitraum wurden die Methoden auf der Basis der neuronalen Netze (SOM sowie ihre adaptive Multilevel-Variante SOBM) zu einer gewissen Reife im Rahmen einer Dissertation (T. Galliat) geführt. Nach dem Weggang dieses Doktoranden in die Industrie wurde eine Reihe weiterer Heuristiken verfolgt, insbesondere die Methode der sukzessiven PCCA (Perron-Clusteranalyse) von Torsionswinkeln. Diese Methode erwies sich als erstaunlich robust, obwohl sie noch gewisse augenfällige Lücken aufweist, die in der Folge geschlossen werden sollen. Die Klassifizierung metastabiler Konformationen konnte durch einen neuen Ansatz, die sogenannte PCCA+, verbessert werden; hierbei werden die bisher verwendeten diskontinuierlichen charakteristischen Funktionen durch kontinuierliche “schwachcharakteristische Funktionen” ersetzt. Auf diese Weise ergibt sich ein hinreichendes und notwendiges Kriterium zur eindeutigen Lösbarkeit des Clusterproblems. Darüberhinaus wurden erste Schritte in Richtung auf eine völlig andere Behandlung der Thematik mittels “gitterfreier Methoden” getan.

Im Berichtszeitraum wurde ein Teil dieser Arbeiten im Rahmen des Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik (BCB) durch eine Nachwuchsgruppe (F. Cordes) zum Thema *Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening* vom BMBF gefördert. Nach wie vor besteht in diesem Projekt eine Anbindung an die Biotech-Firma AnalytiCon Discovery, Potsdam; ein substantiell erweiterter Kooperationsvertrag ist in Vorbereitung. Arbeiten zum Thema Moleküldynamik gehen auch in die Arbeit im DFG-Forschungszentrum *Mathematik für Schlüsseltechnologien* ein (Teilprojekt A4), wobei dort insbesondere reduzierte Modelle für Proteine im Vordergrund stehen. Darüberhinaus haben Mitglieder der ZIB-Arbeitsgruppe auch zu dem neu eingerichteten *Bachelor-Studiengang Bioinformatik* an der FU durch Vorlesungen und Software-Praktika beigetragen sowie Studierende im zugehörigen Master-Programm ausgebildet.

*Integrierte Optik.* Dieser Schwerpunkt hat im Berichtszeitraum einen weiteren Aufschwung genommen. Darin wird die Simulation integriert-optischer Halbleiterkompo-

zenten bis hin zur Signalübertragung auf optischen Glasfasernetzen bearbeitet. Methodische Quelle unserer Aktivitäten ist nach wie vor die *Laplace-Domain-Methode* von F. Schmidt (ZIB). Sie gestattet die Konstruktion besonders effizienter neuartiger Algorithmen zu diskreten transparenten Randbedingungen für alle Arten von Wellengleichungen (vorzugsweise Elektrodynamik, aber auch Akustik und Quantenmechanik).

Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt der Aktivitäten auf Implementierung und Anwendung der im Jahr zuvor entwickelten Algorithmen. Mit der erfolgten Weiterentwicklung des adaptiven Multilevel-FEM-Baukastens KASKADE in C++ sind wir nun in der Lage, auch dreidimensionale Probleme der optischen Nano-Technologien effizient zu lösen.

Diese Forschungsaktivitäten spielten eine wichtige Rolle bei der Einwerbung von Drittmitteln in den BMBF-geförderten Verbundprojekten *Photonische Kristalle* und *Optik Design*. Beide Verbundprojekte haben zu einer Reihe von neuen Industriekooperationen, wie z.B. mit der Siemens AG und der Optun GmbH geführt. Auch innerhalb des DFG-Forschungszentrums *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (Teilprojekt D9) werden Themen der optischen Technologien in Theorie und Anwendung bearbeitet. Um die Aktivitäten zu Photonischen Kristallen im Berliner und Brandenburger Raum zu bündeln, haben wir ein überregionales *Seminar "Photonische Kristalle - Modellierung, Simulation und Technologie"* ins Leben gerufen.

Die Spin-off-Firma *JCMwave* entwickelte 2002 die Simulationsplattform *JCMmode* für optische Wellenleiter in einer ersten Version und stellte sie bereits auf der ECOC 2002 und der CeBIT 2003 vor. Bei Anwendung von *JCMmode* auf industrielle Probleme der Nanotechnologie, insbesondere mit Multiskalencharakter, erlaubte die von uns entwickelte Software ein erfolgreiches Design von Komponenten in Parameterbereichen, bei denen bisher verbreitete Programmpakete versagen.

*Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle.* Die langjährige DFG-geförderte Kooperation mit der Arbeitsgruppe K. Schaber (Verfahrenstechnik, TH Karlsruhe) wurde Ende 2002 zum Abschluß gebracht. Mit der Fertigstellung der Simulationssoftware AERCODE steht nun ein robustes Instrument zur Simulation komplexer Szenarien der Aerosolentstehung in Industriereaktoren zur Verfügung. Ebenfalls in der chemischen Verfahrenstechnik angesiedelt ist die langjährige Kooperation mit der Arbeitsgruppe R. Adler (Universität Halle), deren DFG-Förderung Ende 2003 ausläuft; hierbei erfolgte sogar ein echter Austausch von Mitarbeitern zwischen Berlin und Merseburg. Im Projekt "Dynamische Dimensionsreduktion bei CVD-Reaktoren", gefördert innerhalb des BMBF-Verbundprojektes "Anwendungsbezogene Mathematik", wurde im Berichtszeitraum weiter an der theoretischen Erfassung der auftretenden Phänomene gearbeitet; gleichzeitig wurden erste Schritte in Richtung auf die geplante Integration der einzelnen Softwaremodule der beteiligten Partner gegangen, was durch den Weggang eines Schlüsselmitarbeiters (in die USA!) bei unserem Kooperationspartner F. Durst (Strömungsmechanik, U Erlangen) deutlich erschwert worden ist.

Bereits im letzten Jahr begann eine Umorientierung in Richtung Medizintechnik, die



in Berlin fachlich hervorragend vertreten ist. Arbeiten zur muskuloskelettalen Modellierung und Simulation der Tibia im Rahmen der DFG-geförderten Klinischen Forschergruppe *Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese* (Ltg. N. Haas und G. Duda, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU) erzielten in diesem Jahr erstmals vorzeigbare Erfolge. Im Mittelpunkt der Untersuchungen standen Analyse und Implementierung verschiedener Algorithmen zur Korrektur messfehlerbehafteter Gangdaten von Schafen. Daneben wurde mit der Entwicklung eines verfeinerten, räumlich dreidimensionalen muskuloskelettalen Modells des Schafbeins begonnen. In einem zweiten Themenkomplex wurden erste FEM-Rechnungen mit dem adaptiven Multilevel-Code KARDOS an vereinfachten Modellen einer Fraktur durchgeführt. Ein Teil dieser Arbeiten wird in Kooperation mit R. Kornhuber und R. Krause (FU, Mathematik) im Rahmen des DFG-Forschungszentrums *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (Teilprojekt A2) theoretisch und algorithmisch vorangetrieben. Als begleitende Aktivität sind Simulationen des menschlichen Unterkiefers mit KASKADE in Kooperation mit C. Kober (FH Osnabrück) zu nennen.

Trotz Ablehnung des SFB 1946 durch die DFG hat die Dynamik der Duftcodierung bei Honigbienen in Kooperation mit R. Menzel (FU, Neurobiologie), G. Galizia (inzwischen Riverside, Californien, USA) und R. Hochmuth (U Freiberg) weiterhin unser hohes Interesse – siehe auch den Schwerpunkt ‘Virtuelle Labore’. Ein DFG-Paketantrag mit M. Heisenberg (Biozentrum U Würzburg) und R. Menzel (FU, Neurobiologie) ist geplant.

*Optimale Steuerung.* In diesem Schwerpunkt sind Aktivitäten der Arbeitsgruppen Numerische Methoden und Diskrete Methoden zusammengefasst. Im Berichtszeitraum erschien das Lehrbuch *Numerische Mathematik II. Gewöhnliche Differentialgleichungen* von P. Deuffhard und F. Bornemann sowie die von W.C. Rheinboldt übersetzte englische Fassung *Scientific Computing with Ordinary Differential Equations*; es enthält ein eigenes Kapitel über die bisher etablierte numerische Behandlung von Problemen der optimalen Steuerungen. Seit einiger Zeit werden am ZIB neuartige adaptive Multilevel-Methoden zur Behandlung solcher Themen entwickelt, die funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden (M. Weiser, P. Deuffhard). Die diesbezüglichen Arbeiten wurden weiter ausgedehnt, insbesondere in Richtung auf partielle Differentialgleichungen im Rahmen des DFG-Forschungszentrums *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (Teilprojekt A1, Kooperation mit F. Tröltzsch, TU, Mathematik). Eine erste Anwendung der neuen Ideen in der Hyperthermieplanung ist in Vorbereitung.

*Computergestützte Therapie- und Operationsplanung.* Im Mittelpunkt stand die Weiterentwicklung des 3D-Systems zur Planung von knochen- und weichgewebeverlagernden Eingriffen in der MKG-Chirurgie. Die 3D-Gittergenerierung berücksichtigt nun material- und geometrieabhängige Parameter, eine Kollisionserkennung ermöglicht die korrekte, interaktive Verlagerung von Knochenteilen und fotografische Aufnahmen können durch Texturprojektion auf das 3D-Patientenmodell

übertragen werden. In Kooperation mit Universitätskliniken wurde das Planungssystem FACELAB an verschiedenen klinischen Fragestellungen erprobt. Die technischen Voraussetzungen für eine netzverteilte, kooperative Planung wurden im Rahmen eines BMBF-geförderten Projekts geschaffen.

Im SFB 273 "Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie" wurde das Planungssystem HYPERPLAN derart erweitert, daß aus MR-Daten, die während der Behandlung gemessen werden, die Perfusions- und die Temperaturverteilung extrahiert werden können. Dies eröffnet die Möglichkeit, mit Methoden der Parameteridentifikation eine Online-Nachoptimierung der Behandlungsparameter durchzuführen. Eine mit HYPERPLAN durchgeführte retrospektive Simulationsstudie für Patienten mit Rektumkarzinom ergab eine hohe Korrelation des klinisch evaluierten Erfolges mit der mathematisch berechneten 'Hyperthermierbarkeit', d.h. mit der technisch und anatomisch bedingten Möglichkeit Wärme in den Tumor einzubringen. Zweifellos ist dies ein starkes Indiz dafür, daß es sich lohnt, auch nach Ablauf des SFB 273 Ende 2002 die Hyperthermie-Forschung weiterzuführen. Das Planungssystem wird in der Folge von der Spinoff-Firma INDEED GMBH zu einem kommerziellen Produkt weiterentwickelt. Im Rahmen des DFG-Forschungszentrums *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (Teilprojekt A1) wurde eine mathematisch saubere Multiskalenmodellierung der Thermoregulation im Gefäßsystem begonnen, zunächst auf der mikrovaskulären Ebene.

Gemeinsam mit E.-J. Haberl, Charité, Campus Virchow-Klinik, wurden Untersuchungen zur computergestützten Planung von operativen Korrekturen frühkindlicher Schädeldefehlbildungen vorgenommen. Sie mündeten in eine DFG-geförderte Studie, in der Planungskriterien zur chirurgischen Schädelumformung etabliert und ein 3D-Atlas normal-geformter frühkindlicher Schädelmodelle erstellt werden sollen.

*Biomedizinische Bildverarbeitung.* Die Schwerpunkte im Berichtszeitraum waren die modellbasierte Segmentierung auf Basis statistischer 3D-Formmodelle sowie die Segmentierung, Skelettierung und Visualisierung sehr großer Bilddatensätze.

Als Grundlage zur computergestützten Planung von Leberresektionen wurde in Zusammenarbeit mit der chirurgischen Arbeitsgruppe P. Schlag (Charité, Campus Buch, HU) ein Verfahren zur automatischen Segmentierung aus CT- oder MR-Daten entwickelt. Aus einem Set von interaktiv erzeugten 3D-Modellen wurden die mittlere Leberform und charakteristische Abweichungen gefunden. Das mittlere Modell wird bei der Segmentierung als deformierbar aufgefaßt und an die Bilddaten angepaßt – ohne den Unterraum der 'erlaubten' Formen zu verlassen. Dies führte bereits im ersten Anlauf zu zufriedenstellenden und robusten Segmentierungen. Die Problemstellung wird im Rahmen des DFG-Forschungszentrums *Mathematik für Schlüsseltechnologien* (Teilprojekt F2) weiterverfolgt, insbesondere die Etablierung eines für den Vergleich geometrischer Flächen geeigneten Funktionals.

Neue Verfahren zur Analyse von 3D-Bilddaten, insbesondere zur Extraktion und Visualisierung linien- und flächenhafter Strukturen, wurden im Rahmen eines Forschungsverbundes zur Analyse der Knochenfeinstruktur entwickelt (Förderung

durch die ESA). Die Methoden zur Alignierung großer Bildstapel und zur 3D-Rekonstruktion wurden in einem BMBF-Verbundprojekt verbessert, das sich mit der Erkennung und Analyse raumzeitlicher Entwicklungsmuster, wie etwa Gen-Expressionsmustern, bei der Pflanzenentwicklung befaßt.

*Virtuelle Labore.* Dieser Schwerpunkt hat sich auch im Berichtszeitraum weiterhin enorm entfaltet. Im *Virtuellen Molekül-Labor* wurden Verfahren zur Analyse von Moleküloberflächen, zur Berechnung der Solvatisierungsenergie und zur Konstruktion von Grenzflächen zwischen Molekülen hinzugenommen. Begonnen wurde zudem mit der Entwicklung eines Verfahrens, das aus RNA-Sequenzen durch Vergleich mit Sequenzen bekannter Strukturen näherungsweise 3D-Modelle erstellt. Verfahren zur hierarchischen Zerlegung metastabiler Freiheitsgrade können nun auch in Amira durchgeführt werden, ebenso wie die Suche nach metastabilen Mengen mit Hilfe der Perron-Cluster-Analyse. Durch die Darstellung der Zerlegungen als Konfigurationsmengen kann die gesamte Funktionalität zur Konformationsvisualisierung verwendet werden.

Bei der Weiterentwicklung des *Virtuellen Astrophysik-Labors* standen Verfahren zur Darstellung symmetrischer Tensorfelder und skalarer Felder auf adaptiv verfeinerten Gittern im Vordergrund. Visualisierungen umfangreicher Simulationsdaten, z.B. zur Berechnung des letzten Orbits zweier verschmelzender schwarzer Löcher oder zur Entstehung und Entwicklung der ersten Sterne des Universums, fanden große Resonanz in den Medien, z.B. beim US-Sender Discovery Channel, in weltweit ausgestrahlten Dokumentationssendungen sowie in internationalen Zeitschriften wie National Geographic. Hierfür mußten neue Verfahren zur zeitlichen Interpolation von Daten auf hierarchischen Gittern unterschiedlicher Topologie entwickelt werden.

In einem von der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU) geförderten Verbundprojekt zur Landschaftsvisualisierung, wurde in Zusammenarbeit mit der O. Deussen (Informatik, TU Dresden) ein 3D-Viewer entwickelt, der die interaktive Darstellung von Landschaften mit komplexer Vegetation erlaubt. Hierbei kommen neue Szenenrepräsentationen und Level-of-Detail-Algorithmen zum Einsatz, die auch die Fähigkeiten modernster Grafikprozessoren nutzen.

Die methodischen Entwicklungen für das *Virtuelle Neurolabor* zur anatomisch genauen Geometrie-Rekonstruktion wurden fortgesetzt und bildeten die Basis für erste numerische Simulationen der Signalausbreitung in einzelnen Nervenzellen – siehe auch den Schwerpunkt ‘Simulation komplexer Differentialgleichungssysteme’.

Für das *Virtuelle Strömungslabor* wurden in Zusammenarbeit mit H. Theisel (MPI Informatik, Saarbrücken) sowie B. Noack (Strömungsmechanik, TU Berlin) Verfahren zur topologischen Analyse von Vektorfeldern und zur Hervorhebung turbulenter Strömungsanteile entwickelt. Eine internationale Kooperation zu Particle Image Velocimetry wurde begonnen. Hierbei sollen Netztechniken zum Einsatz kommen, die in Drittmittelprojekten zu “Virtuellen Laboren im Grid” entwickelt worden sind.

Amira<sup>TM</sup>, die Basis fast aller virtuellen Labors, wurde in vielerlei Hinsicht wei-

terentwickelt. Das neue Release 3.0 weist erhebliche Verbesserungen beim Skript-Interface, bei der Bildsegmentierung und der Rekonstruktion von glatten Flächen auf. Die Virtual-Reality-Variante AmiraVR bietet erweiterte Möglichkeiten durch 3D-Interaktion die Analyseverfahren zu steuern. AmiraVR wird inzwischen in großen VR-Installationen, z.B. CAVEs oder gar mit Laserprojektoren ausgestatteten Planetarien, eingesetzt.

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 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 (Dissertationspreis 2002 der INFORMS Telecommunications Section sowie der Dissertationspreis 2002 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR) für Andreas Eisenblätter; Dissertationspreis 2002 der GOR Research für Gunnar Klau). Die prominenteste Bestätigung der Forschungsausrichtung ist jedoch die Einrichtung des DFG-Zentrums "Mathematik für Schlüsseltechnologien" an der Technischen Universität Berlin, betrieben von den drei Universitäten, dem Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin. Die Abteilung Optimierung leistet mit fünf Teilprojekten einen substantiellen Beitrag in Telekommunikation, Verkehr und Produktion; alle Teilprojektanträge durchliefen erfolgreich in der Antrags- und Genehmigungsphase eine interne Beurteilung der Antragsteller und die externe Evaluierung der Gutachter.

Die Aktivitäten unseres Bereichs im Berichtszeitraum 2002 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)
- 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. Nach unserer Ansicht ist dies Grund genug, diskrete Mathematik für die Lehrpläne der weiterführenden Schulen attraktiv zu machen. Die Aufbereitung von geeigneten Themen aus der diskreten Mathematik für den Schulunterricht, gefördert von der Volkswagen-Stiftung, bereichert nun diesen Schwerpunkt seit dem letzten Jahr. Nach wie vor beschäftigen uns Grapheneigenschaften wie Perfektheit und Baumweite; diese Eigenschaften stehen in engem Zusammenhang mit der effizienten Lösbarkeit wichtiger Optimierungsprobleme. So sind z. B. Frequenzplanungsprobleme mithilfe von Baumzerlegungen beschränkter Weite der unterliegenden Graphen – entgegen früherer Vermutungen – auch in der Praxis oft einfacher zu lösen. Triangulierungen – oder allgemeiner: polyedrische Unterteilungen – spielen eine gewichtige Rolle in Topologie und Geometrie und haben sich zu selbständigen Forschungsgebieten der diskreten Geometrie entwickelt. In den Projekten zu polyedrischen Unterteilungen von Punktkonfigurationen und triangulierten Mannigfaltigkeiten wurden entsprechende Software-Pakete wesentlich verbessert und zwei Buchprojekte – “Triangulated Manifolds” sowie “Triangulations of Point Sets” – vorangetrieben.

#### *Nichtlineare Optimierung und Steuerung.*

In diesem gemeinsamen Schwerpunkt mit der ZIB-Abteilung “Numerische Analysis und Modellierung” werden nichtlineare Modelle zur Optimalsteuerung und zur stochastischen Optimierung zum Einsatz gebracht. Sowohl die Optimierung der Antennensteuerung in der Hyperthermiebehandlung krebserkrankter Patienten als auch die Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen erfordern per se nichtlineare Modelle. Für dynamische Portfolio-Optimierung sowie die Steuerung chemischer Prozesse unter unsicheren Daten erzwingt die Stochastik Nichtlinearitäten im Optimierungsmodell.

In allen Fällen besteht eine besondere Herausforderung in der Entwicklung adäquater theoretischer und algorithmischer Ansätze für sehr große Modelle, die nach Diskretisierung auf Gittern bzw. Szenariobäumen entstehen.

#### *Telekommunikation.*

Die Telekommunikationsindustrie steht unter einem enormen Druck: UMTS muß ein Erfolg werden, und optische Netze sollen neuen Echtzeit-Diensten mehr Bandbreite und weniger Verzögerung bescheren. Ob nun UMTS oder transparente optische Netze: immer stellt sich für den Planer die Frage, wie ein "gutes" Netz aussehen soll. Diese Frage stellen wir auch in zwei DFG-Zentrums-Projekten zur integrierten Konfiguration von Multilevel/Multilayer-Netzen und zur Planung der UMTS-Funkschnittstelle. Letzteres geht über das EU-geförderte, auf Standardisierung von Verfahren konzentrierte MOMENTUM-Projekt hinaus, indem es sich mit mathematischen Optimierungsverfahren für praxisrelevante Problemgrößen beschäftigt. Projekte zur statischen und dynamischen Konfiguration transparenter optischer Netze in Zusammenarbeit mit der T-Systems Nova wurden erfolgreich abgeschlossen. Weitere Projekte zur Performance-Analyse von Telekommunikationsnetzen, zur Optimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-Win) und zur Last-Ausgleichung von Signal-Transfer-Punkten wurden in Zusammenarbeit mit der Atesio GmbH (ZIB-Spin-Off, Berlin), dem Verein zur Förderung eines deutschen Forschungsnetzes (Berlin), der E-Plus Mobilfunk GmbH (Düsseldorf), der Telekom Austria und der Siemens AG (München) 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.*

Unsere Forschung konzentriert sich in diesem Schwerpunkt auf 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. Unsere Algorithmen beruhen i. d. R. auf polyedrischen Methoden. Zum Beispiel ermöglichen kombinatorischer Relaxierungen das Übertragen von polyedrischer Information von einem gut studierten Problem auf ein verwandtes, bislang unzureichend gelöstes Problem. In der gemischt-ganzzahligen Programmierung konnte durch verbesserte Branch-and-Bound-Verfahren Probleme der MIPLIB, einer Standardproblembibliothek, deutlich schneller gelöst werden als von der kommerziellen Konkurrenz, dem Marktführer CPLEX. Eine weitere Standardproblembibliothek speziell für Steinerbaumprobleme, die SteinLib, wird am ZIB entwickelt, um die Vergleichbarkeit von Forschungsergebnissen zu ermöglichen. Immer mehr Publikationen nehmen darauf Bezug. Um die Errungenschaften der Ganzzahligen Programmierung auch Nicht-Experten für schnelles Prototyping zur Verfügung zu

stellen, führen wir die Entwicklung der Modellierungssprache Zimpl fort.

#### *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. 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. Zwei DFG-Zentrumsprojekte im Anwendungsfeld Produktion untersuchen mathematische Strukturen in Online-Optimierungsproblemen, wie sie in der innerbetrieblichen Logistik, z. B. im Hochregallager unseres Partners eCom Logistik in Falkensee bei Berlin auftreten. Einmal sollen Gütegarantien für modulare Echtzeit-Systeme aus Gütegarantien für die Module hergeleitet werden. Ferner entwickeln wir Reoptimierungsalgorithmen unter besonderer Berücksichtigung der Sensitivität des zugrundeliegenden Offline-Optimierungsproblems. Mit der T-Systems Nova haben wir inzwischen mit einem am ZIB entwickelten dynamischen Netzwerksimulator Online-Algorithmen zum ersten Mal auf einem gemeinsamen, realistischen Verkehrsmodell evaluiert. Unsere echtzeitfähigen Optimierungsalgorithmen für das Online-Dispatching von ADAC-Pannenhilfsfahrzeugen sind inzwischen von der Firma Intergraph Public Safety nachimplementiert worden und laufen in mehreren ADAC-Hilfezentralen im Pilotbetrieb.

#### *Verkehr.*

Wir leisten in diesem Schwerpunkt einen mathematischen Beitrag zur Optimierung von Verkehrssystemen. Neben unseren Projekten im öffentlichen Personennahverkehr (ÖPNV) und in der Transportlogistik stellt nun strategische Planung von Verkehrsnetzen eine neue Herausforderung dar. Daß ein DFG-Zentrumsprojekt zur strategischen Planung im Öffentlichen Personen-Nahverkehr eingerichtet worden ist, weist auf die zentrale Bedeutung dieser Aufgabe hin. Zu diesem Thema entwickeln wir ferner in einem Projekt zur Trassenbörse Modelle zur effektiven Vergabe von Teilen des Gleisnetzes der Deutschen Bahn und Nutzungszeiten an Anbieter von Bahnfahrten. Im fortgeführten Projekt zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung konnten wir im ländlichen Bereich (Regensburg) die Durchführbarkeit dieses Ansatzes bereits nachweisen. Im Berichtszeitraum sind unsere Verfahren bei weiteren Betrieben in den praktischen Einsatz gelangt (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 betrieb-

lichen 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 systemnahen Arbeiten an HPC-Clustern bis zur Konzeption von Grid-Systemen für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Supercomputer reicht. Das verbindende Element zwischen diesen beiden Themenbereichen liegt in der effizienten Nutzung der zugrunde liegenden Hardware- und Softwarekomponenten für verteilte Rechenaufgaben. Auf den untersten Schichten aufbauend entwickeln wir höherwertige Dienste, die den effizienten und benutzerfreundlichen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen.

Unsere Forschung umfaßt die Schwerpunkte Grid- und Cluster Computing. Diese beiden Bereiche lassen sich oftmals nur schwer auseinanderhalten, da sie thematisch und methodisch sehr eng verwandt sind. Der Übergang von den sehr großen Cluster-Systemen – und nur an solchen sind wir interessiert – zu geographisch verteilten Grid-Systemen ist fließend. Auch die theoretischen Grundlagen sind oftmals identisch, so daß manche unserer Arbeiten sowohl dem einen als auch dem anderen Schwerpunkt zugeordnet werden können. Dieser Aspekt kommt auch in dem von uns veranstalteten “IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CC-Grid2002)” zum Ausdruck, in dem beide Aspekte, Grid- und Cluster, gleichberechtigt nebeneinander stehen. Mit 240 Teilnehmern, einem qualitativ hochwertigen wissenschaftlichem Programm und hochkarätigen eingeladenen Vorträgen aus Wissenschaft und Industrie war die CCGrid2002 ein voller Erfolg.

*Grid Computing.* Im Forschungsschwerpunkt Grid Computing liegt unser Hauptaugenmerk in der Entwicklung von Methoden zum Management geographisch verteilter Ressourcen. Unter dem Begriff Ressourcen verstehen wir nicht nur Rechner, sondern auch verteilte Datei- und Archivsysteme, Netzwerke, Visualisierungskomponenten, Softwarepakete und sonstige Systemdienste. Unser 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 werden den Nutzern über die bisher gewohnten Zugriffsmechanismen qualitativ höherwertige Dienste zur Verfügung gestellt und Systembetreiber erzielen eine höhere Auslastung ihrer kostenintensiven Hard- und Software.

Während in den früheren Jahren der Fokus unserer Forschungsarbeiten primär auf der kooperativen Nutzung verteilter Systeme zur Erzielung einer insgesamt höheren Rechenleistung lag, richtet sich nun unser Hauptinteresse zunehmend auf das Management geographisch verteilter Daten. Die dabei auftretenden Probleme des Cachings, Stagings, Routings, der Synchronisierung und Replikation sind mindestens ebenso schwer lösbar wie die des Scheduling und Mappings, die bei der rechenintensiven Anwendung im Grid auftreten. In beiden Fällen spielt die Dynamik der beteiligten



Komponenten (Netzwerke, Speicher, Rechenknoten) eine zentrale Rolle.

*Cluster Computing und Anwendungen.* Cluster werden zunehmend als Rechen- und Datenspeicherknoten in Grid-Systemen eingesetzt und ersetzen hier schon teilweise die dedizierten Hochleistungsrechner. Daher beschäftigen wir uns in diesem Schwerpunkt mit der effizienten Einbettung der lokalen (Cluster-) Ressourcen-Managementsysteme in die darüberliegende Grid-Ebene. Verschiedene lokale Managementsysteme müssen mit einheitlichen Schnittstellen und universellen Adaptionen versehen werden, um die Dienste der Grid-Ebene adäquat bedienen zu können. Dies ist eine unserer Hauptaufgaben im DataGrid-Projekt. Im Rahmen eines Industrieprojekts (IBM Faculty Award) erforschen wir Methoden zur kooperativen Reservierung von Ressourcen. Dies ist notwendig, wenn z.B. Simulationsanwendungen zeitgleich auf mehreren Clustern ablaufen sollen, oder komplexe Anwendungen während ihrer Ausführung eine garantierte Datenübertragungsbandbreite benötigen.

Komplexe Demonstratoranwendungen für Cluster-Systeme finden sich in der Bioinformatik. Sie ist für uns ein besonders interessanter Anwendungsbereich, da bei der Sequenz- oder Strukturvorhersage umfangreiche Datenmengen verarbeitet werden, was sehr große Anforderungen an Bandbreite und Latenzzeit der Verbindungsnetzwerke (sowohl innerhalb von Clustern als auch im Grid) stellt. Unser Ziel besteht darin, sehr effiziente parallele Algorithmen zur Strukturvorhersage zu entwickeln, die nicht nur schnell rechnen, sondern auch ein ausgewogenes Rechen/Datentransportverhalten aufweisen und damit auf Cluster-Systemen mit verteiltem Speicher effizient ablaufen.

## 2.2 Schwerpunkte

### 2.2.1 Molekulare Konformationsdynamik

#### **Sukzessive Perron Cluster Analyse (PCCA) von Dihedralwinkeln**

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Frank Cordes, Marcus Weber,  
Johannes Schmidt-Ehrenberg

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

Bei der Identifizierung von Konformationen eines Moleküles zur statistischen Beschreibung der Dynamik von Konformationsänderungen besteht eine zentrale Aufgabe darin, einen Markov-Operator, der die Dynamik des Moleküles widerspiegelt, geeignet durch eine Übergangsmatrix zu diskretisieren. Bisher wurde dazu ausschließlich der SOBM Algorithmus verwendet [6]. An die Diskretisierung des Konformationsraums des Moleküles schließt sich eine Clusteranalyse an, die geeignete Teilmengen der Diskretisierung zu metastabilen Bereichen zusammenfasst. Diese Analyse liefert gut interpretierbare Ergebnisse, wenn die Übergangsmatrix einen Cluster von Eigenwerten (Perron Cluster) aufweist, der nahe bei dem Perron Eigenwert 1 liegt [7]. Das zugehörige Analyseverfahren müsste korrekt als Perron Cluster Cluster Analyse be-

zeichnet werden und wird daher im folgenden durch PCCA abgekürzt [3]. Notwendig für eine PCCA ist eine genügend feine Diskretisierung des Konformationsraums [5], was bei einem hochdimensionalen Konformationsraum zu einer exponentiell steigenden Zahl von Diskretisierungsboxen führen würde.

In aktuellen Arbeiten hat sich gezeigt, dass in den meisten Fällen bereits einzelne Dihedralwinkel des Moleküls eine hohe Metastabilität indizieren [5]. Da sich einzelne Dihedralwinkel für eine PCCA genügend fein diskretisieren lassen und daher gut interpretierbare Ergebnisse liefern, haben wir einen Algorithmus entworfen, der die Metastabilitäten der Dihedralwinkel für eine sukzessive Grobdiskretisierung des Konformationsraums nutzt, siehe Abbildung 2.1. Führt ein Dihedralwinkel zu einer Zerlegung des Konformationsraums, so wird die sukzessive PCCA erneut auf den einzelnen Teilmengen durchgeführt. Dadurch können auch Metastabilitäten identifiziert werden, die im ersten Schritt noch verdeckt waren.

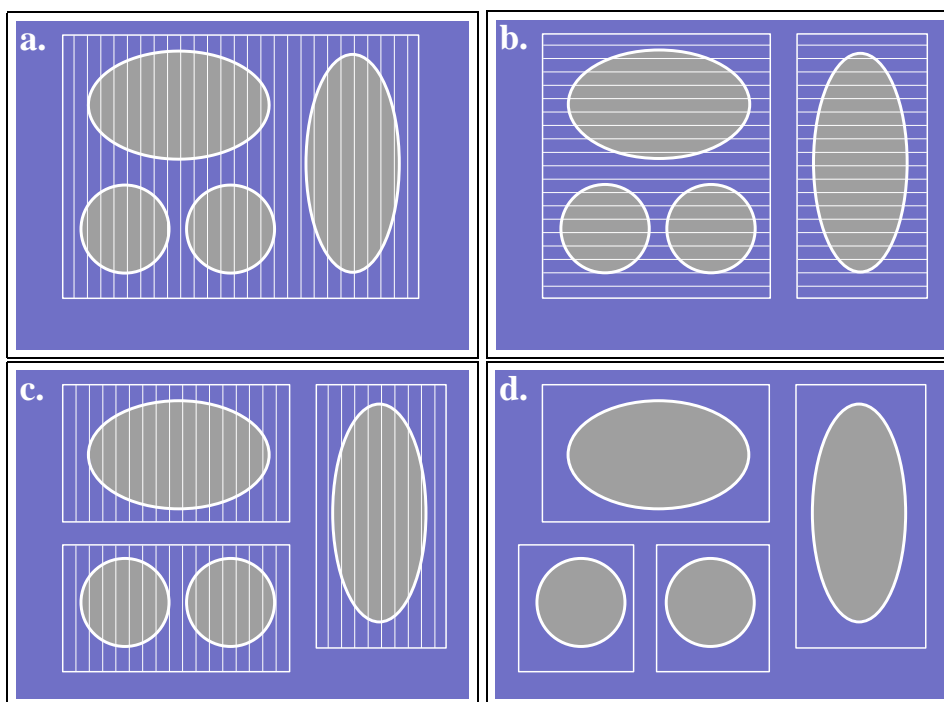


ABBILDUNG 2.1: Sukzessive PCCA der Dihedralwinkel: In diesem Beispiel wird der Konformationsraum durch zwei Dihedralwinkel aufgespannt. Metastabile Bereiche werden durch Ellipsen dargestellt. a)-c) Es werden jeweils diejenigen Diskretisierungen pro Freiheitsgrad gezeigt, die eine Metastabilität aufweisen und zu einer Zerlegung des Konformationsraums führen. d) Die resultierende Grobdiskretisierung.

Die sukzessive PCCA ist eingebettet in ein hierarchisches Simulationsprotokoll, bei dem das Molekül zunächst bei hoher Temperatur simuliert wird, die metastabilen Bereiche getrennt werden und in diesen Bereichen bei niedrigerer Temperatur erneut

simuliert wird. Die Anwendung der sukzessiven PCCA als Diskretisierungsmethode führte in bisherigen numerischen Experimenten immer zu einer besseren Konvergenz von Simulationen innerhalb identifizierter metastabiler Konformationsbereiche. Das Konvergenzverhalten dient somit als "a posteriori" Indikator dafür, dass sämtliche Metastabilitäten erfasst worden sind.

Neben der Verbesserung der Konvergenz durch die Identifizierung der Metastabilitäten eines Moleküles, bietet die Konformationsanalyse die Möglichkeit zum Übergang zu längeren Zeitskalen der Dynamik. Der signifikante Anstieg der deterministischen Zeitskala  $\tau$  zu der Zeitskala  $\tau_{\mathcal{S}_i}$  einer metastabilen Konformation ergibt sich zu [3]:

$$\tau_{\mathcal{S}_i} \approx \frac{\tau}{1 - w_{ii}},$$

wobei  $w_{ii} \approx 1$  die Metastabilität der Konformation  $\mathcal{S}_i$  definiert.

Das bisherige Konzept der sukzessiven PCCA kann zur Zeit noch keine Metastabilitäten identifizieren, die aus Korrelationen von Dihedralwinkel hervorgehen. Dieses Problem wird zukünftig noch gesondert behandelt werden.

### **Konformationsdatenbanken für das virtuelle Screening**

**Bearbeitet von:** Frank Cordes, Alexander Steidinger, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** L. Müller-Kuhr (AnalytiCon Discovery GmbH, Potsdam), Nachwuchsgruppe (BCB/ZIB) "Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern", Nachwuchsgruppe (BCB/Charité) "3-D strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement"

**Förderung:** Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB), AnalytiCon Discovery GmbH, Potsdam

Im Berichtszeitraum konzentrierte sich die Nachwuchsgruppe "Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening" wesentlich auf die Automatisierung, Analyse, Visualisierung und Nutzung der Konformationsdynamik für das Virtuelle Screening. Der automatischen Präparation kleiner Ligandenbibliotheken hinsichtlich der Anbindung von Kraftfeldparametern und Generierung stereochemisch sinnvoller Startstrukturen folgte die Berechnung der Konformationsdynamik auf dem parallelen Höchstleistungsrechner des ZIB mit Hilfe eines hierarchischen Simulationsprotokolls [9]. Mitte des Jahres wurde das Simulationsprogramm zusätzlich auf dem Linux - Cluster implementiert, der durch die am ZIB arbeitenden Nachwuchsgruppen des BCB angeschafft wurde.

Die visuelle und statistische Analyse der Simulationsdaten führte zu einer neuartigen Diskretisierung des hochdimensionalen Zustandsraums (siehe Abschnitt 2.2.1). Diese Diskretisierung, die auf der Identifikation von Dihedralwinkeln beruht, die eine hohe Metastabilität indizieren, verbessert nicht nur visuell das Verständnis für Moleküldynamik, sondern lässt sich vor allem numerisch für effiziente Monte Carlo Simulationen zur Berechnung von metastabilen Konformationen nutzen [9].

Die berechneten Konformationen sollen für die Strukturvorhersage von Protein-Ligand Komplexen eingesetzt werden. Wir haben deshalb das zentrale Ziel der Entwicklung eines Dockingprogrammes aufgenommen, und zwar in zwei Stufen. In einer ersten Stufe wird das aktive Zentrum eines Proteins mit Hilfe eines Point-Matching Algorithmus gesucht. Die Punktemengen, die miteinander verglichen werden, resultieren aus der Pharmakophor-Darstellung des Liganden einerseits und der Berechnung der Potentialpeaks an der Oberfläche des Proteins andererseits. Die Matchingstrategie beruht auf einer physikalisch motivierten Modellierung, nach der sich Punkte gleichen Typs durch ein "Coulomb-Potential" anziehen. In bisher allen Testfällen konnte das aktive Zentrum des Proteins identifiziert werden. In der zweiten Stufe des Dockings werden Liganden, die mit Hilfe des Pointmatching das aktive Zentrum gefunden haben, dort unter Maßgabe der gesamten nicht-kovalenten Wechselwirkungen zwischen Ligand und Protein in die energetisch günstigste Orientierung durch Energieminimierung überführt. Die Abweichung zwischen den energieminimierten Strukturen und den aus Röntgenstrukturanalyse bekannten Komplexdaten, die zum Test der Methode verwendet wurden, liegt im Mittel im Bereich von 1Å. Zur endgültigen Bewertung der vorhergesagten Protein - Ligand Komplexe muss noch eine Bewertung der freien Energieänderung des Bindungsvorgangs (Scoring) erarbeitet werden.

Zur grafischen Unterstützung des virtuellen Screenings wurden flexible Visualisierungswerkzeuge innerhalb der Visualisierungssoftware AmiraMol entwickelt [12]. Auf Basis von Atom-Atom-Korrespondenzen können Alignments für große Anzahlen von Molekülkonformationen berechnet und zur Berechnung gemittelter Molekülgeometrien genutzt werden (siehe Abbildung 2.2). Eine Pseudodichte, dargestellt mit Hilfe von Isoflächen und Direct Volume Rendering, gibt Aufschluss über flexible Molekülteile (siehe Abschnitt 2.2.6).

### **Schwach-charakteristische Funktionen**

**Bearbeitet von:** Marcus Weber, Tobias Galliat, Peter Deuffhard

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

Zur Konformationsanalyse eines Moleküles wird durch Anwenden eines Markov-Operators ein geeignetes Ensemble des Zustandsraumes generiert. Nach dem Generieren der Samplingdaten und der Diskretisierung des Markov-Operators durch eine stochastische Übergangsmatrix folgt der Klassifizierungsschritt. In diesem werden die Diskretisierungsboxen bezüglich der Übergangswahrscheinlichkeiten zu fast invarianten Teilmengen des Ortsraumes zusammengefaßt.

Bisher wurde dazu die Perron-Clusteranalyse (PCCA) verwendet [1, 7]. Ein verbesserter Ansatz, im folgenden PCCA+ genannt, bei dem man detailliertere Informationen aus den Perron-Eigenvektoren gewinnt, nutzt eine Simplexstruktur der Daten aus. Er überführt die Eigenvektoren aus der PCCA durch eine lineare Transformation in schwach-charakteristische Funktionen oder Zugehörigkeitsvektoren [2]. Jeder dieser Vektoren steht dabei für eine der fast invarianten Teilmengen des Ortsraumes und weist

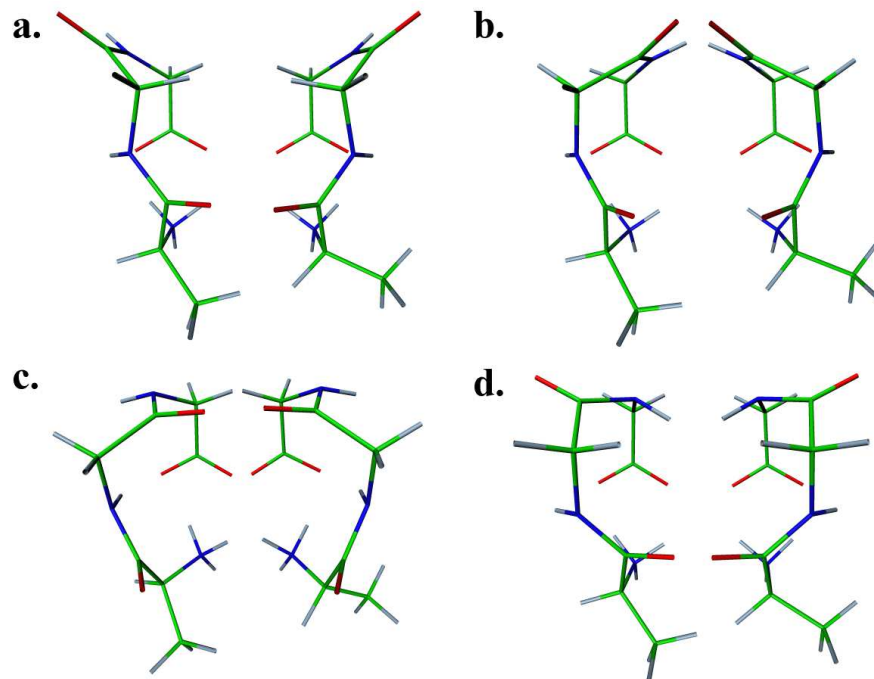


ABBILDUNG 2.2: Acht gemittelte metastabile Konformationsmengen des Peptids ala-gly-gly: Die Moleküle sind auf ein Referenzmolekül aligniert. Die paarweise Anordnung soll die partielle Symmetry betonen. Die thermodynamischen Gewichte der Konformationen in a-d betragen bei 300K 63.07% und 33.18%, 1.52% und 1.66%, 0.19% und 0.08%, 0.09% und 0.05%.

jeder Diskretisierungsbox einen Zugehörigkeitsgrad zu diesen Teilmengen, den Konformationen, zu.

PCCA+ basiert auf einer Abbildung der Diskretisierungsboxen auf einen  $k$ -dimensionalen Raum, wobei die Koordinaten der einzelnen Punkte durch die entsprechende Komponente der  $k$  Perron Eigenvektoren gegeben sind. Kernstück der PCCA+ Klassifizierungsmethode ist die Konstruktion eines Simplexes, das die projizierten Punkte einschließt.

Spannen die Datenpunkte selber einen Simplex auf, dann kann eine eindeutige Transformation der Eigenvektoren in Zugehörigkeitsvektoren vorgenommen werden. Die Eckpunkte des Simplexes stehen dabei jeweils für eine Konformation, die Lage der Punkte innerhalb des Simplexes bestimmen die Zugehörigkeiten der entsprechenden Diskretisierungsbox zu den einzelnen Konformationen. Dieses Vorgehen erlaubt demnach auch eine Analyse des Moleküles hinsichtlich seiner Übergangszustände.

Daß die Datenpunkte einen Simplex aufspannen, ist also eine *hinreichende* Bedingung für die Lösbarkeit der Klassifizierungsaufgabe mit dem PCCA+ Algorithmus. Anfang 2003 konnte gezeigt werden [4], dass die Simplexstruktur auch als *notwendige* Be-

dingung aus der Klassifizierbarkeit der Daten resultiert. Dieses Resultat macht den PCCA+ Algorithmus zur geeigneten Methode zur Bestimmung der Konformationen.

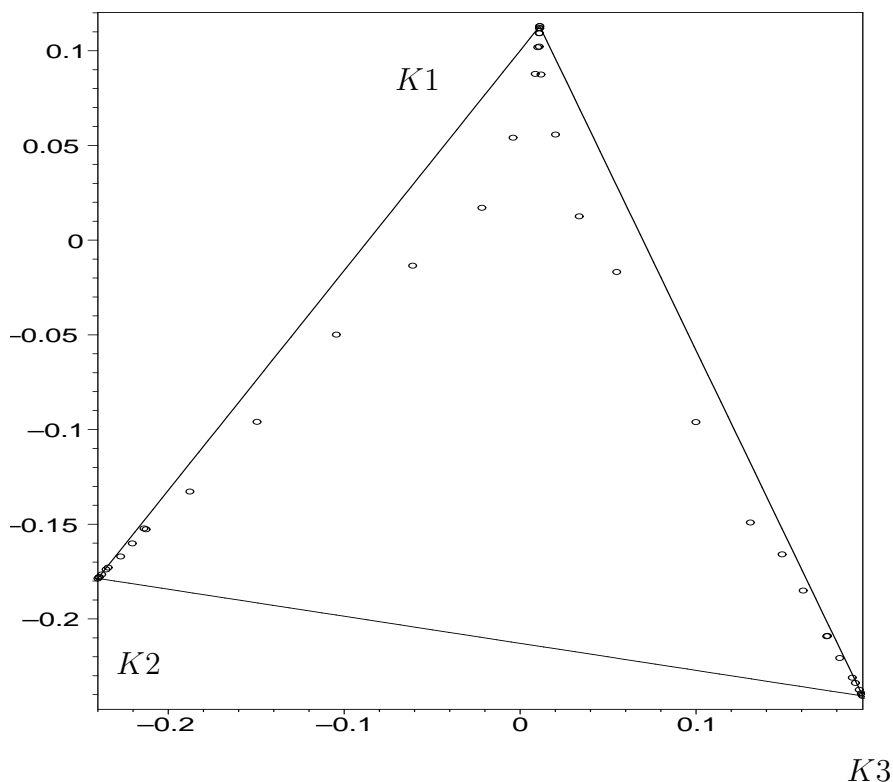


ABBILDUNG 2.3: Projektion der Diskretisierungsboxen mit Hilfe der Perron Eigenvektoren einer Übergangsmatrix erzeugt durch eine Simulation von Butan bei 300K und einem Zeitschritt von  $\tau = 200 fs$ . Bestimmung der Zugehörigkeiten über den PCCA+ Algorithmus.

Als Beispiel für die Aussagekraft der Zugehörigkeitsvektoren zeigt Abbildung 2.3 einen solchen Simplex. Das entsprechende Molekül weist drei Konformationen auf. Übergänge finden in diesem Beispiel nur über die Konformation  $K1$  nicht jedoch zwischen den Konformationen  $K2$  und  $K3$  statt. Eine Analyse des Moleküles ergibt, daß dieser Übergang tatsächlich aufgrund sterischer Hinderung eine hohe Energiebarriere aufweist. Außerdem lassen sich die Diskretisierungsboxen genau angeben, die den Übergangszuständen entsprechen.

Weiter konnte gezeigt werden, dass die Zuteilung der Diskretisierungsboxen zu den jeweiligen Konformationen durch den PCCA+ zumindest im Falle von zwei Konformationen im Hinblick auf die Metastabilität der entstehenden Mengen optimal ist [5]. In diesem Artikel wird der Begriff Metastabilität, der auf  $L_1$ -Funktionen zugeschnitten ist, mit dem Autokorrelationsbegriff, der für  $L_2$ -Funktionen definiert ist und zur Konstruktion der Eigenvektoren passt, in Verbindung gebracht.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

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

Die Einbettung des SOBM-Algorithmus [10] in einen Multilevel-Ansatz wurde dahingehend verbessert, das nunmehr frühzeitig durch Neuronen-Pruning die Komplexität des neuronalen Netzes verringert und somit eine bessere Skalierbarkeit des Algorithmus erreicht wird. Als problematisch hinsichtlich der Geschwindigkeit der Konformationsanalyse insgesamt hat sich allerdings die Tatsache herausgestellt, dass der multivariate Ansatz des SOBM-Algorithmus ein gleichmäßiges Sampling des zu diskretisierenden Raumes benötigt. Dies ist aber gerade bei hohen Simulations-Temperaturen oftmals nicht der Fall, da hier der Konfigurationsraum mit großen Sprüngen abgetastet wird. Dieses schnelle, relativ grobe Sampling des Raumes ist einer der zentralen Vorteile der Coupling/Uncoupling-Methode. Die Verwendung des SOBM-Algorithmus auf hoher Ebene führt deshalb zu einer ungewollten Verlängerung des Samplings. Die Stärken des SOBM-Algorithmus liegen demnach vor allem dort, wo starke nichtlineare Zusammenhänge aufzudecken sind bzw. in weniger zeitkritischen Anwendungen, wie z.B. im Bereich der Versicherungswirtschaft.

**Gitterfreie Identifizierung von Konformationen** (Marcus Weber, Peter Deuffhard; Förderung: DFG Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien")

Neben den Methoden zur Diskretisierung des Übergangsooperators durch Zerlegung des Ortsraumes des Moleküls in überschneidungsfreie Teilmengen oder, was dazu äquivalent ist, durch eine Zerlegung der konstanten 1-Funktion in paarweise orthogonale charakteristische Funktionen, wurden bereits Methoden untersucht, bei denen die 1-Funktion in nicht-orthogonale *weiche* Zugehörigkeitsfunktionen zerlegt wurde, deren Grundlage radiale Basisfunktionen sind und deren Maxima jeweils in einem der Datenpunkte liegen.

Ziel ist es hierbei, von einer gitterabhängigen Beschreibung des Übergangsooperators zu einer punktwisen Auswertung zu gelangen und damit eine Klassifizierung direkt auf den Samplingdaten zu vollziehen.

Probleme dieser Methode sind noch die Verschlechterung der Kondition bei wachsender Dichte der Daten und der hohe Aufwand durch die nicht-verschwindenden Überlappungsintegrale der Ansatzfunktionen.

In numerischen Experimenten haben wir untersucht, ob es möglich ist, sich bei den gitterfreien Methoden auf Teilmengen des Ortsraums zu beschränken, um die Dimension des Eigenwertproblems gering zu halten, und ob es möglich ist, die tatsächliche Berechnung der Eigenvektoren des eingeschränkten Operators bei der Klassifizierung der Daten zu vermeiden. Bisher liegt dazu ein entsprechendes Modul in AMIRA vor.

**Publikationen**

- [1] P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer und Ch. Schütte. Identification of almost invariant aggregates in reversible nearly uncoupled Markov chains. *Lin. Alg. Appl.* **315**, S. 39-59, 2000.
- [2] M. Weber und T. Galliat. Characterization of Transition States in Conformational Dynamics using Fuzzy Sets. Report 02-12, ZIB, 2002.
- [3] P. Deuffhard. From Molecular Dynamics to Conformational Dynamics in Drug Design. In *Trends in Nonlinear Analysis*. M. Kirkilionis, S. Krömker, R. Rannacher, F. Tomi, editors. 269-287, Springer, 2003.
- [4] M. Weber. Improved Perron Cluster Analysis. Report 03-04, ZIB, vorauss. April 2003.
- [5] F. Cordes, M. Weber und J. Schmidt-Ehrenberg. Metastable conformations via successive Perron-Cluster cluster analysis of dihedrals. Report 02-40, ZIB, 2002.
- [6] T. Galliat. Adaptive Multilevel Cluster Analysis by Self-Organizing Box Maps. Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, FU Berlin, 2002.
- [7] P. Deuffhard, A. Hohmann. Numerische Mathematik I, Eine algorithmisch orientierte Einführung. 3. Auflage, S. 153-165, Walter de Gruyter Berlin, New York 2002.
- [8] P. Deuffhard, A. Hohmann. Numerical Analysis in Modern Scientific Computing: An Introduction. Second edition, Springer, Texts in Applied Mathematics, vol. 43, 2003.
- [9] A. Fischer, C. Schütte, P. Deuffhard, and F. Cordes. Hierarchical uncoupling-coupling of metastable conformations. In [11], 235-261, Springer 2002.
- [10] T. Galliat, P. Deuffhard, R. Roitzsch, and F. Cordes. Automatic identification of metastable conformations via self-organized neural networks. In [11], 262-284, Springer 2002.
- [11] 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.
- [12] J. Schmidt-Ehrenberg, Daniel Baum, H.-C. Hege. Visualizing Dynamic Molecular Conformations. Proceedings of IEEE Visualization, S. 235-242, 2002.



### 2.2.2 Integrierte Optik

Im Schwerpunkt *Integrierte Optik* stehen gegenwärtig die Entwicklung von Algorithmen zur Simulation der Lichtausbreitung in photonischen Kristallen und das Design entsprechender integriert-optischer Komponenten im Mittelpunkt der Arbeiten. Im Berichtsjahr wurden zwei Projekte zu industrie-relevanten Anwendungen photonischer Kristalle begonnen (Förderung durch das BMBF im Rahmen eines Verbundprojekts mit der Industrie). Weitere zwei Projekte, die auf ein vertieftes theoretisches Verständnis von optischen Streuprozessen und darauf aufbauend auf die Entwicklung völlig neuer Algorithmen abzielen, wurden im Rahmen des DFG-Forschungszentrums “Mathematik für Schlüsseltechnologien” in Angriff genommen. Neben den Schwierigkeiten der technologischen Nanostrukturierung sind es vor allem fehlende oder zu schwerfällige Simulationsverfahren, die dem breiten Durchbruch der photonischen Kristall-Technologie entgegenstehen. Mit den Projekten im Schwerpunkt Integrierte Optik versuchen wir, den Entwicklern deutlich effektivere Simulationsverfahren zur Verfügung zu stellen.

Der Problembereich *Simulation photonischer Kristalle* ist in zwei Gebiete unterteilt: (a) Die Bestimmung von Banddiagrammen photonischer Kristalle und (b) die Streuung von Licht an komplexen Strukturen aus photonischen Kristallen. In beiden Gebieten wurden im Berichtszeitraum neue Ansätze verwirklicht.

#### Photonische Kristalle – Schnelle Berechnung von Bandstrukturen

**Bearbeitet von:** Frank Schmidt, Lin Zschiedrich, Sven Burger

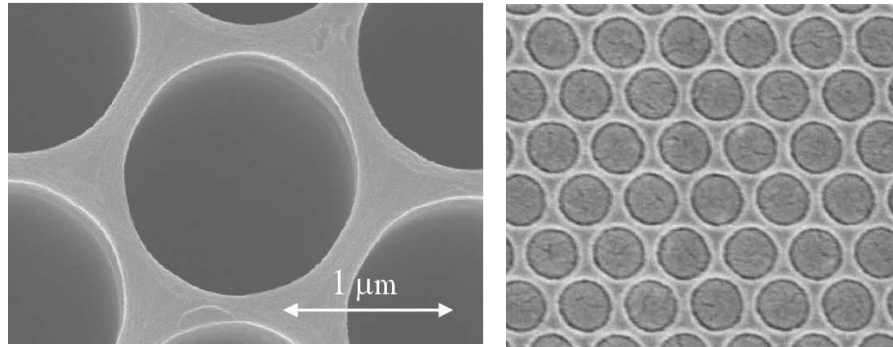
**Kooperationspartner:** Alfred Forchel (Julius-Maximilians-Universität, Würzburg), Sebastian Golka, Helmut Heidrich (Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik — Heinrich-Hertz-Institut, Berlin), Christian Herrmann, Ortwin Hess (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Stuttgart), Cecile Jamois, Ralf Wehrspohn (Max-Planck-Institut für Mikrostrukturtechnik, Halle), Reinhard März (Infineon Technologies AG, München), Christoph Wächter (Fraunhofer Institut für angewandte Optik und Feinmechanik, Jena), Klaus Wandel (Sentech Instruments GmbH, Berlin).

**Förderung:** BMBF-Projektverbund “Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation”.

Photonische Kristalle (PhC) sind Materialien, die eine periodische Modulation des Brechungsindices auf einer kleinen Längenskala besitzen. Bei geeigneten Parametern besitzen sie photonische Bandlücken, d.h. die Lichtausbreitung in photonischen Kristallen kann komplett unterdrückt werden. Photonische Kristalle versprechen vielfältige Anwendungen in verschiedenen Bereichen der Optik, insbesondere für die Miniaturisierung optischer Komponenten (integrated optical chips).

In *elektronischen* Halbleitern breiten sich die Ladungsträger in einem durch die regelmäßig angeordneten Kristallatome periodisch modulierten Potential aus. Die Mehrfachstreuung in dem Potential führt zu charakteristischen Änderungen in der elektro-

nischen Bandstruktur und zum Auftreten von Bandlücken. Durch gezieltes Einbringen von Störstellen kann die Bandstruktur manipuliert werden, was seit Jahrzehnten die Grundlage der Elektronik bildet.



(University of Toronto)

ABBILDUNG 2.4: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von zweidimensionalen photonischen Kristallen. Mit Hilfe der Molekularstrahlepitaxie, Elektronenstrahlolithographie und Ätztechniken werden periodische Anordnungen von Löchern in Silizium-Substraten erzeugt.

Bei *photonischen* Kristallen ist der Brechungsindex des – im homogenen Zustand transparenten – Materials periodisch moduliert (siehe Abbildung 2.4). Analog zum Verhalten von elektronischen Halbleitern können Bandlücken in der Dispersionsrelation der Photonen dann auftreten, wenn die Wellenlänge des Lichtes von der Größenordnung der Modulationsperiode des Materials ist. Maßgeschneiderte Lichtausbreitung innerhalb der Bandlücken kann z.B. durch das Einbringen von Störstellen in den photonischen Kristall erreicht werden. Die denkbaren Anwendungsgebiete von photonischen Kristallen sind entsprechend vielfältig, von Einzelkomponenten wie extrem wellenlängen-selektiven Filtern, über miniaturisierte integrierte Multifunktionselemente wie Verteilerstationen von optischen Signalen, bis hin zu neuartigen Materialsystemen für die nichtlineare Optik.

Im Berichtszeitraum wurde ein schneller 2D/3D-Finite-Elemente Solver für Banddiagramme photonischer Kristalle entwickelt. Lichtausbreitung wird von den Maxwell-Gleichungen beschrieben, aus denen sich für zeitharmonische Probleme in photonischen Kristallen eine spezielle Eigenwertgleichung ableiten lässt. Die am weitesten verbreitete Methode zur Lösung dieser Gleichung und damit zur Bestimmung von Banddiagrammen beruht auf der Approximation der Lösung durch eine Überlagerung ebener Wellen (Plane-Wave-Method, *PWM*). Als Alternative hierzu wurde in dem beschriebenen Projekt ein Finite-Elemente Solver entwickelt, der die Lösung der Eigenwertgleichung durch lokal begrenzte Ansatzfunktionen approximiert und die Anpassung an die Periodizität des Mediums (in Form von Bloch-Wellen) durch periodische

Randbedingungen gewährleistet. Ein so berechnetes Banddiagramm und die Konvergenz eines Eigenwertes im Vergleich mit den Ergebnissen eines am MIT entwickelten PWM-Lösers sind in Abbildung 2.5 dargestellt.

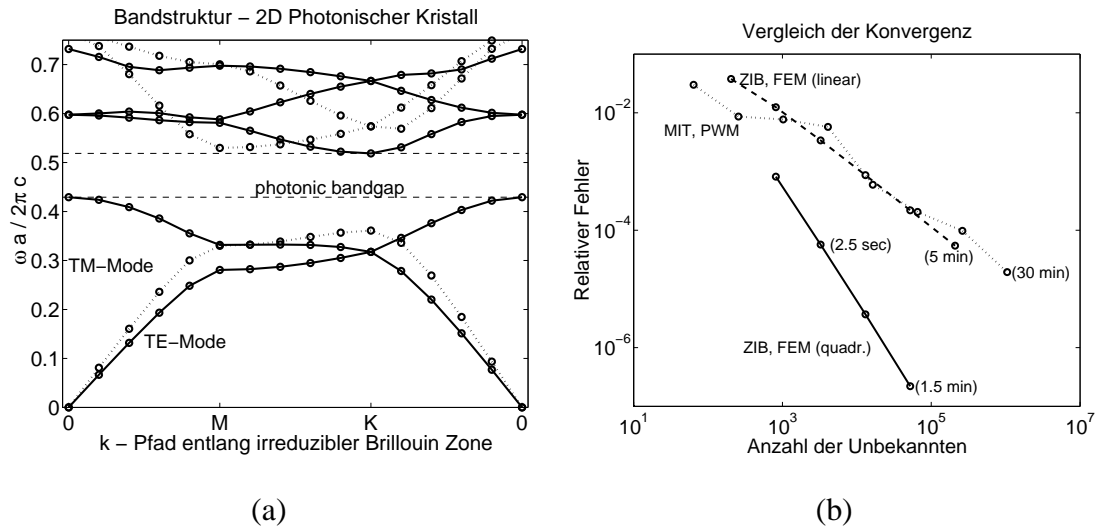


ABBILDUNG 2.5: (a) Bandstruktur eines zweidimensionalen photonischen Kristalls (ZIB-FEM). (b) Relativer Fehler vs. Anzahl  $N$  der Freiheitsgrade. Für quadratische finite Elemente konvergiert der Fehler quadratisch mit  $N$ , die Konvergenzgeschwindigkeit für lineare Elemente und für die mit der PWM erzielten Lösungen ist dagegen nur linear.

Die Überlegenheit der Finite-Elemente Methode mit speziell angepassten Solvern für große, dünn besetzte Gleichungssysteme [1] gegenüber der Ebene-Wellen-Methode kommt nicht nur in der Konvergenzgeschwindigkeit der Lösungen zum Ausdruck (vgl. Abbildung 2.5b), sondern zeigt sich auch in der Schnelligkeit der Berechnungen. So können die Eigenwerte etwa  $10^2$ – $10^3$  mal schneller berechnet werden als bei gleicher Genauigkeit mit der am MIT entwickelten Standard-Software. Für dreidimensionale Simulationen erwarten wir sogar noch eine Vergrößerung dieses Faktors.

### Photonische Kristalle – Simulation der Lichtausbreitung in nanostrukturierten Medien

**Bearbeitet von:** F. Schmidt, L. Zschiedrich, S. Burger

**Kooperationspartner:** Alfred Forchel (Julius-Maximilians-Universität, Würzburg), Sebastian Golka, Helmut Heidrich (Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik — Heinrich-Hertz-Institut, Berlin), Christian Herrmann, Ortwin Hess (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Stuttgart), Cecile Jamois, Ralf Wehrspohn (Max-Planck-Institut für Mikrostrukturtechnik, Halle), Reinhard März (Infineon Technologies AG, München), Christoph Wächter (Fraunhofer Institut für angewandte Optik und

Feinmechanik, Jena), Klaus Wandel (Sentech Instruments GmbH, Berlin).

**Förderung:** BMBF-Projektverbund “Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation”.

Die Berechnung von Bandstrukturen beruht auf der Idealisierung eines unendlich ausgedehnten photonischen Kristalls. In der Realität hat ein photonischer Kristall allerdings endliche Ausdehnung und weist Abweichungen von der Periodizität auf (Dotierung). Darüber hinaus ist ein photonischer Kristall in der Regel auf einem optischen Chip integriert und steht somit in Wechselwirkung mit anderen, zum Teil herkömmlichen optischen Bauteilen. Die Simulation der Lichtausbreitung in solchen Systemen führt daher auf Streuprobleme mit einer starken Variation der räumlichen Längenskalen. Die Simulation der Ankopplung photonischer Kristalle an Lichtwellenleiter erfordert die Bereitstellung transparenter Randbedingungen [2]. An dieser Stelle knüpfen die Arbeiten im Berichtszeitraum an die Tätigkeiten der vergangenen Jahre an [3, 4]. Die auf Matlab basierende Simulationsplattform für elektromagnetische Streuprobleme wurde für die Anwendung auf photonische Kristalle erweitert und unseren Kooperationspartnern zur Verfügung gestellt. Abbildung 2.6 zeigt die Feldverteilung eines Lichtstrahls beim Durchgang durch einen endlich ausgedehnten photonischen Kristall. In diesem Fall ist die Berechnung des Brechungswinkels zwischen dem in den Kristall einfallendem Lichtstrahl und dem austretendem Lichtstrahl von Interesse. Deutlich zeigen sich die gegenüber unstrukturierten Materialien anomalen Brechungseigenschaften. In Abbildung 2.7 ist der Durchgang des Lichts durch einen Defektwellenleiter gezeigt. Hier ist der Leistungsverlust zwischen dem links einfallenden Licht und dem oben austretenden Licht von Interesse. Da die auf Matlab basierende Software-Plattform für die anstehenden 3D-Simulationen nicht tragfähig ist, wurde im Berichtszeitraum mit der Umstellung der Simulationssoftware auf das C++-Paket EMAX begonnen.

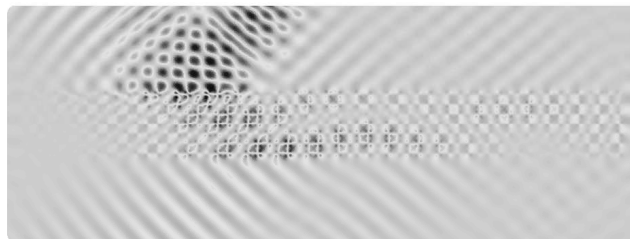


ABBILDUNG 2.6: Reflexion und Brechung eines optischen Strahls an einer photonischen Kristall-Struktur. Makroskopisch scheint das Material einen negativen Brechungsindex zu besitzen.

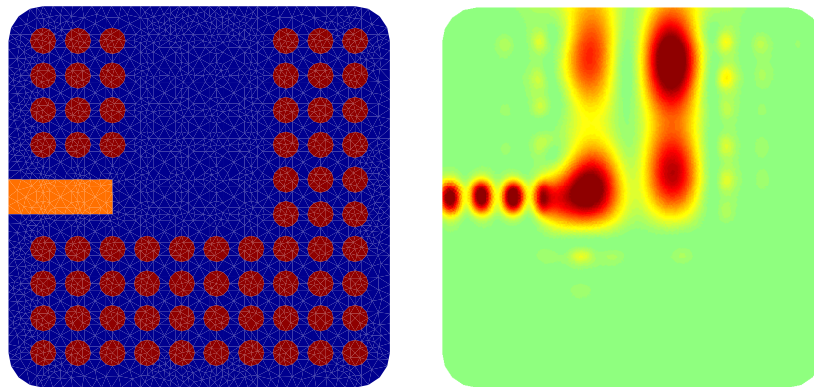


ABBILDUNG 2.7: Schema eines Photonischen-Kristall-Wellenleiters mit 90°-Knick (links) und berechnete Lichtausbreitung (rechts).

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Transparente Randbedingungen für die lineare Schrödingergleichung** (L. Zschiedrich, F. Schmidt; Kooperation: A. Schädle, Universität Tübingen; X. Antoine, Université Paul Sabatier; D. Yevick, University of Waterloo, Canada; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Im Berichtszeitraum wurde dieses Projekt abgeschlossen. Im Mittelpunkt standen Konvergenzuntersuchung für die Polbedingungsmethode im Vergleich mit der PML-Methode. Hierbei konnte die numerische Realisierung der Polbedingungsmethode verbessert werden. Es zeigte sich, dass man die Polbedingung im Außenraum auf ein endliches Rechengebiet transformieren kann, was dann eine einfache numerische Behandlung zulässt. Damit steht neben der klassischen PML-Methode ein weiteres einfach zu handhabendes und effektives Werkzeug zur Konstruktion transparenter Randbedingungen zu Verfügung. Einen weiteren Schwerpunkt bildete die effiziente Implementierung des Verfahrens in 3D.

**Einbettungstechniken für regionale Atmosphärenmodelle** (F. Schmidt; Kooperation: R. Klein, FU Berlin und Potsdamer Institut für Klimafolgenforschung)

Eine der wichtigen aktuellen Fragen der Klimamodellierung betrifft den regionalen Einfluss globaler Klimaänderung. Eine direkte globale Simulationen mit einer Auflösung, die hoch genug ist, um auch lokale Details zu erfassen, ist vom Simulationsaufwand her nicht vertretbar. Als eine Alternative bietet sich die Einbettung regionaler Klimamodelle mit entsprechend hoher Detailauflösung in wesentlich gröber aufgelöste globale Klimamodelle an. Diese Einbettung erfordert den Einsatz von nichtreflektierenden Randbedingungen an den Einbettungsgrenzen. Im Berichtszeitraum wurde eine Strategie entwickelt, die die Übertragung der in den Vorjahren entwickelten Theorie nichtreflektierender Randbedingungen von den elektromagnetischen und akusti-

schen Problemen auf die Probleme der Klimamodellierung ermöglicht. Dieses Projekt kann momentan leider nicht fortgeführt werden, da es die interdisziplinären Kooperationsmöglichkeiten der SFB-Initiative 1946 zur Voraussetzung hatte und diese Initiative von der DFG nicht genehmigt wurde.

### Publikationen

- [1] P. Deuffhard, F. Schmidt, T. Friese, and L. Zschiedrich, *Adaptive Multigrid Methods for the Vectorial Maxwell Eigenvalue Problem for Optical Waveguide Design*, in W. Jäger and H. J. Krebs (eds.) *Mathematics - Key Technology for the Future*, pp.279–293, Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [2] T. Hohage, F. Schmidt, and L. Zschiedrich, *A new method for the solution of scattering problems*, in B. Michielsen and F. Decavele (eds), *Proceedings of the JEE'02 Symposium*, pp. 251–256, ONERA, Toulouse, 2002.
- [3] T. Hohage, F. Schmidt, L. Zschiedrich: *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition. I:Theory*. SIAM J. Math. Anal., accepted (2003).
- [4] T. Hohage, F. Schmidt, L. Zschiedrich: *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition. II:Convergence of the PML method*. SIAM J. Math. Anal., accepted (2003).

### 2.2.3 Simulation komplexer Differentialgleichungsmodelle

Die zentralen Themen in diesem Schwerpunkt sind die Fragen einer geeigneten Modellierung der zu simulierenden Phänomene und die problemorientierte Modifikation und Erweiterung von Algorithmen und Softwarepaketen zur effizienten und robusten Integration von großen, komplexen Systemen von Differentialgleichungen. Zunehmende Bedeutung gewinnen dabei die Themenbereiche Sensitivitätsanalyse und Parameteridentifizierung in Differentialgleichungsmodellen.

#### Heterogene muskuloskelettale Modellierung und Simulation der Tibia

**Bearbeitet von:** Rainald Ehrig, Bodo Erdmann, Ulrich Nowak, Peter Deuffhard, Stefan Zachow, Milka Trifunovic

**Kooperationspartner:** Klinische Forschergruppe “Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese” der DFG (Georg Duda, Norbert Haas, Markus Heller, Bill Taylor, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin)

Mit Anfang des Jahres 2002 begann die Kooperation mit der Charité im Rahmen eines Teilprojektes einer von der DFG geförderten Klinischen Forschergruppe. Ziel dieser Zusammenarbeit ist es, durch ein vertieftes Verständnis der muskuloskelettalen Belastungen und der biologischen Prozesse während der Frakturheilung eine möglichst

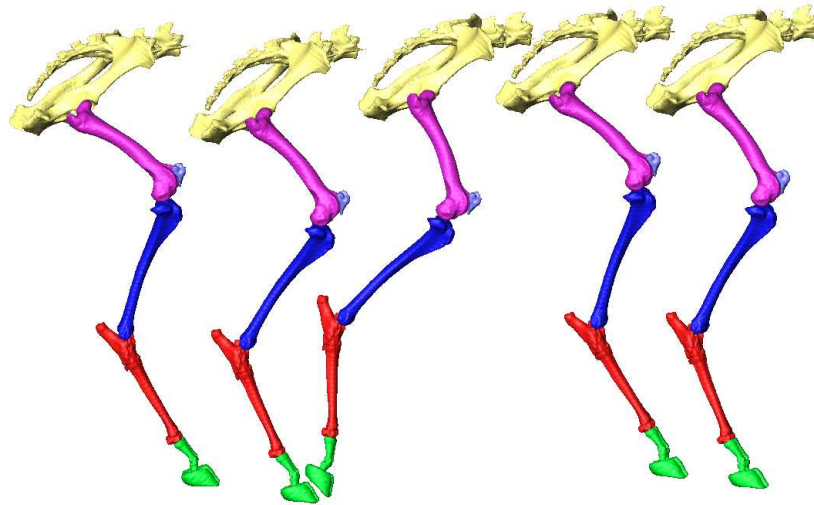


ABBILDUNG 2.8: Animation eines gemessenen Schafgangs

schnelle Rehabilitation zu ermöglichen.

Innerhalb des Berichtszeitraums wurden bereits wichtige Teilprojekte in Angriff genommen. Ein detailliertes muskuloskelettales Modell benötigt eine Analyse der während unterschiedlicher Bewegungen auftretenden Kräfte und Spannungen in den Knochen und Gelenken, die sich aus gemessenen Gangdaten ableiten lassen. Diese Daten ermöglichen in Kombination mit CT-Messungen des Bewegungsapparates auch eine dynamische Visualisierung des Ganges, siehe Abbildung 2.8.

Zur Evaluierung der hierfür verwendeten apparativen und numerischen Methoden werden Gangdaten von Schafen verwendet. Hierbei sind zusätzlich zu den Hautmarkern Knochenmarker möglich, die eine Kontrolle der Genauigkeit der aus Hautmarkern gewonnenen Daten erlauben. Ein wesentliches Problem ist hierbei die Bewegung von Hautmarkern relativ zum darunterliegenden Knochen. Zur Korrektur dieser Fehler wurde eine Reihe von Verfahren aus der Literatur theoretisch und praktisch analysiert, als auch eine Reihe eigener Verfahren untersucht (Orthogonale Distanz-Regression in  $L_2$ - und  $L_1$ -Norm, thin plate splines). Es zeigte sich aber, dass kein Verfahren kollektive Bewegungen von Hautmarkern ausreichend korrigieren kann. Daher muss die praktische Durchführung der Messung der Gangdaten entweder ergänzt werden durch zusätzliche Kalibrierungen oder kombiniert werden mit anderen Methoden (etwa Fluoroskopie), um ein realistisches Abbild des Ganges von Mensch oder Schaf im Rechner in der erforderlichen Genauigkeit zu gewinnen.

Um aus den Gangdaten des Schafes die auftretenden Kräfte und Momente zu berechnen, wurde bisher ein räumlich 2-dimensionales Modell auf der Grundlage der inversen Dynamik verwendet. Hierbei wird für jeden Zeitschritt aus der gemessenen

Bodenreaktionskraft und den aus den Bewegungsdaten zugänglichen Beschleunigungen in den Gelenken sukzessive die dort auftretenden Kräfte bestimmt. Derzeit wird an der Entwicklung und Implementierung eines räumlich 3-dimensionalen Modells gearbeitet. Eine aktuell untersuchte Problematik dieses Modells ist etwa die korrekte Kraftaufteilung über die 2 Kondylen im Kniegelenk, das realistisch nicht als ideales Kugelgelenk modelliert werden kann. Ausgehend von dieser Modellierung mit dem Ansatz der inversen Dynamik soll später ein Modell auf Grundlage einer direkten Dynamik entstehen, das dann kinematische Muskelmodelle beinhaltet.

In einem zweiten Themenkomplex des Projektes geht es um die robuste und effiziente FEM-Simulation der Frakturstelle. Für die Frühphase einer Frakturheilung erfolgt die Modellierung mit einem linearen poroelastischen Materialansatz sowohl für den verletzten Knochen als auch für das umgebende Kallusgewebe. Dieses Modell liefert einen Zusammenhang zwischen der linear-elastischen Verformung und dem Porendruck im Gewebe während einer Zeitspanne, in der eine Last auf den Knochen aufgebracht wird. In ersten Simulationsrechnungen mit dem adaptive FEM-Code KARDOS werden die Modellgleichungen mit quadratischen Elementen diskretisiert, da auch die auftretenden Verzerrungen (Ableitungen der Verschiebungen) korrekt approximiert werden müssen. Die Bemessung der Zeitschritte in der Lastphase und die Steuerung der Gitterfeinheit im Ort erfolgen adaptiv. Zunächst wird an vereinfachten geometrischen Modellen des gebrochenen Knochen gerechnet. Auftretende Stabilitätsprobleme bei der Lösung der inhärenten linearen Gleichungssysteme erfordern weitere Untersuchungen.

Ziel des Projektes ist die Erarbeitung eines heterogenen Differentialgleichungsmodells und dessen effiziente Simulation.

### **Adaptive FEM-Simulation des menschlichen Unterkiefers**

**Bearbeitet von:** Bodo Erdmann, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** Cornelia Kober (Fachhochschule Osnabrück, Hightech-Forschungs-Zentrum TU München), Jens Lang (Technische Universität Darmstadt), Robert Sader, Hans-Florian Zeilhofer (Kantonsspital Basel/Universitätskliniken, Hightech-Forschungs-Zentrum TU München), Rolf Krause (FU, Mathematik)

Zur Erklärung der langfristigen Veränderungen am menschlichen Kiefer ist das Verständnis des Belastungsprofils bei Bissituationen von grundlegendem (zahn-)medizinischem Interesse. Die komplexe Geometrie und das raffinierte Zusammenspiel der Kaumuskulatur machen die Simulation des Unterkiefers zu einem komplexen biomechanischen Problem.

Eine korrekte und zugleich effiziente numerische Umsetzung erfordert den Einsatz adaptiver Algorithmen wie der am ZIB entwickelten adaptiven FEM-Codes KASKADE und KARDOS. Im Rahmen des Projekts wurde diese Verfahren auf die Bearbeitung allgemeiner linear elastischer anisotroper Gleichungen erweitert. Für den Spezialfall eines orthotropen Materialgesetzes in einer beliebigen Geometrie muß der



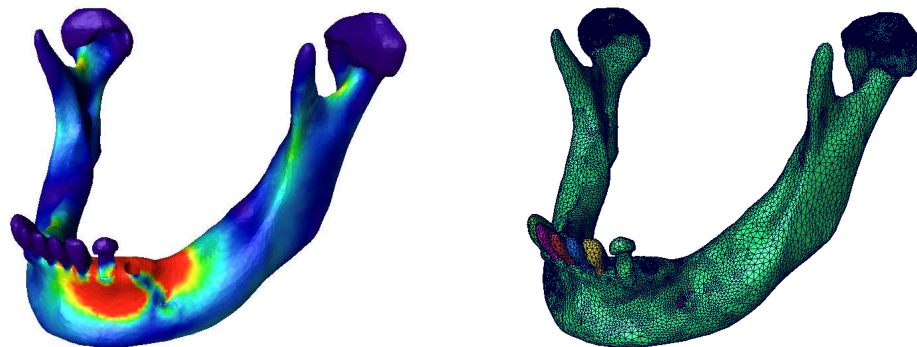


ABBILDUNG 2.9: Unterkiefersimulation bei Biss auf harten Gegenstand. Links: Von Mises Spannung. Rechts: Adaptives FEM-Gitter

Benutzer lediglich die problemabhängigen ausgezeichneten elastischen Trajektorien bereitstellen.

Als Beispielfall für die Simulation wurde die teilbezahnte Mandibula des weiblichen Visible Human Datensatzes gewählt. Nach einer Überlagerung der CT-Daten mit den anatomischen Schnitten wurden Schädel, Mandibula (Spongiosa, Kortikalis, Zähne getrennt), Kaumuskulatur und vereinfachte Gelenkkapseln semiautomatisch mit Hilfe der am ZIB entwickelten Visualisierungssoftware AMIRA segmentiert.

Im Berichtszeitraum wurden zwei typische Bißsituationen, ein Zusammenbiß und ein seitlicher Biß auf den linken Prämolare, simuliert. Bei dem seitlichen Biß konnte eine qualitative Vergleichbarkeit des Belastungsprofils mit der Verteilung der über die Hounsfield-Werte der CT-Daten zugänglichen optischen Dichte des Unterkieferknochens festgestellt werden. Dies kann als Beitrag zur Validierung der Modellierung und Simulation gewertet werden.

Bei einem senkrechten Biß auf einen harten metallischen Gegenstand wird der Zahn durch die Kraft der Kaumuskulatur nach oben gepreßt. Er bohrt sich in den Knochen, man spürt einen Schmerz am unteren Ende der Zahnwurzel. In unserer Simulation finden wir an dieser Stelle im Zahnfach eine deutliche Spannungsspitze, vgl. Abbildung 2.9, links. Dies führt zu einer adaptiven lokalen Verfeinerung der Gitter. In Abbildung 2.9, rechts, ist das zweimalig lokal verfeinerte Gitter dargestellt.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Simulation neuronaler Differentialgleichungsmodelle** (Ulrich Nowak, Peter Deuffhard; Kooperation: Randolph Menzel, Giovanni Galizia (Institut für Neurobiologie, FU Berlin, inzwischen Riverside, Kalifornien, USA), Reinhard Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg, Konrad-Zuse-Fellow))

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

Begonnen wurde mit der Entwicklung und Implementierung eines Softwaremoduls, das die Eingabe von geometrisch komplexen Neuronen, ihre Modellierung mit oft genutzten Membranmodellen und ihre Kompartimentierung erleichtern soll. Im Gegensatz zu den Techniken in gängigen Simulationspaketen wie etwa NEURON oder GENESIS, soll die numerische Integration der entstehenden differentiell-algebraischen Systeme großer Dimension mit einem adaptiven Verfahren, hier LIMEX, erfolgen.

Das Projekt war ebenfalls Teilprojekt im abgelehnten SFB-Antrag 1946. Es soll trotzdem im ZIB weitergeführt werden.

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

Im Berichtszeitraum standen die Arbeiten zur geeigneten Modellierung und Parametrisierung der Wärmeausbreitungsphänomene im Bereich nahe der Reaktorwand im Vordergrund. Ziel der Arbeiten ist eine einheitliche Formulierung, die sich auch für sehr unterschiedliche Reaktorauslegungen (verschiedene Formen der Katalysatorkörner, unterschiedliche Rohrdurchmesser) und Fahrweisen einsetzen lässt. Zweiter Schwerpunkt waren umfangreiche Implementierungsarbeiten an dem Simulations- und Parameteridentifikationssoftwarepaket MORESEEPACK [4], insbesondere im Bereich des Pre- und Postprozessing. So wurde unter anderem eine einfache graphische Bedienoberfläche realisiert und ein Modul zur Glättung von als Randbedingung verwendeten Temperaturmesswerten durch Ausgleichssplines hoher Ordnung entwickelt.

**Effiziente Sensitivitätsberechnung im Kontext von Prozessoptimierung** (Ulrich Nowak, Rainald Ehrig; Kooperation: Martin Schlegel, Wolfgang Marquardt (Lehrstuhl für Prozesstechnik, RWTH Aachen))

Im Rahmen dieses Kooperationsprojekts wurden weitere Untersuchungen zur effizienten Sensitivitätsberechnung mit dem Integrator LIMEX durchgeführt [5]. Von besonderem Interesse waren hierbei der Einsatz im Bereich der dynamischen Prozessopti-

mierung und ein Vergleich zu dem BDF-basierten Verfahren DASSL. Für eine wichtige Problemklasse zeigten sich teilweise dramatische Effizienzvorteile für das Verfahren LIMEX, die auf die zugrunde liegende Einschrittstruktur von LIMEX zurückzuführen sind.

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

Mit der Implementierung von homogener Keimbildung in übersättigten Gasphasen und der Simulation der heterogenen und homogenen Aerosolentstehung im System  $\text{H}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  wurde die Kooperation im wesentlichen abgeschlossen. Damit sind auch Kombinationen von heterogener und homogener Keimbildung modellmäßig zu behandeln, aus denen sich ausgeprägte polydisperse Verteilungen ergeben können. Das Programm AerCoDe steht nun in den folgenden Versionen bereit:

- eindimensional, für monodisperse oder diskret polydisperse Aerosole, Zeitintegrator LIMEX
- zweidimensional, für polydisperse Aerosole auf Grundlage von Populationsbilanzen, PDG-Löser KARDOS

Beide Programme werden vom Kooperationspartner zur Simulation der unterschiedlichsten Szenarien der Aerosolentstehung, des Wachstums und Zerfalls genutzt und ggf. weiterentwickelt. Die verwendeten Ansätze, die Grundzüge der Modellierung und ausgewählte Ergebnisse wurden in zwei Publikationen [6, 7] dargestellt.

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

Das Ziel des Vorhabens ist es, einen neuartigen Algorithmus zur numerischen Simulation von CVD-Reaktoren (CVD - *chemical vapor deposition*) auf der Basis mathematischer Analysis und effizienter Numerik zu entwickeln. Als Grundlage werden die gemeinsam von der Stuttgarter und der Berliner Arbeitsgruppe in den letzten Jahren entwickelten Methoden der dynamischen Dimensionsreduktion verwendet.

Im Berichtszeitraum wurden die Bemühungen auf die theoretische Erfassung des Einflusses der Strömung auf die Dimension des zu lösenden Systems der partiellen Differentialgleichungen vom Diffusion-Reaktions-Transport-Typ gerichtet. Parallel zu den theoretischen Untersuchungen zur Entwicklung von Algorithmen wurde mit der Implementierung von Basisprogrammmodulen begonnen. Der erstellte Code

wurde am Beispiel der Knallgasreaktion getestet. Die numerischen Ergebnisse zeigen, daß das Verfahren mit der dynamischen Dimensionsreduktion die Integration der steifen gewöhnlichen Differentialgleichungen mit deutlich größeren Zeitschritten als das Standardverfahren (linear impliziter Euler), praktisch ohne Genauigkeitsverlust, ermöglicht.

### **Affin-Invarianz bei diskretisierten partiellen Differentialgleichungen** (Peter Deuffhard, Ulrich Nowak, Martin Weiser)

Im allgemeinen Rahmen der Affin-Invarianz sind kürzlich drei verschiedene Varianten des Newtonverfahrens ausgearbeitet worden. Diese wurden anhand von diskretisierten Randwertproblemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen untersucht [10].

Die behandelten affin-invarianten Algorithmen sind: (a) affin-kovariante Newtonverfahren (früher affin-invariant genannt), an den Fehlern der Iterierten orientiert, (b) affin-kontravariante Newtonverfahren, basierend auf den Residuen und (c) affin-konjugierte Newtonverfahren für nichtlineare elliptische PDEs und konvexe Optimierungsprobleme, an der Energienorm orientiert.

Ausgearbeitet wurden Theorie und Algorithmen jeweils sowohl für exakte Newtonverfahren, wobei die auftretenden linearen Gleichungssysteme durch direkte Verfahren gelöst werden, als auch für inexakte Newtonverfahren, die stattdessen iterative Gleichungslöser verwenden.

Dabei stellt sich heraus, daß für die betrachteten diskretisierten Differentialgleichungen fehlerbasierte Methoden prinzipiell den residuenbasierten vorzuziehen sind. Inexakte affin-kovariante Newtonverfahren leiden jedoch darunter, daß im Gegensatz zum residuenbasierten GMRES kein bekannter fehlerbasierter iterativer Löser für die linearen Gleichungssysteme vergleichbar effizient ist. Im Falle elliptischer nichtlinearer Differentialgleichungen bilden dagegen affin-konjugierte Newtonverfahren und dazu passende vorkonditionierte CG-Verfahren eine effiziente Kombination.

### **Adaptive Lösung von Liouville-Gleichungen** (Martin Weiser; Kooperation: Illia Horenko, FU Berlin)

Quantenchemische Vorgänge können in vielen Situationen durch die klassische oder die quanten-klassische Liouville-Gleichung beschrieben werden. Dies sind Vereinfachungen der Schrödingergleichung, die in Orts- und Impulskoordinaten formuliert werden und somit eine quasi-klassische Interpretation ermöglichen. Da die Raumdimension mit der Anzahl der beteiligten Teilchen wächst, versagen Gittermethoden schon für recht kleine Anwendungsbeispiele, so daß häufig zu Monte-Carlo-Verfahren gegriffen wird. Diese erschweren jedoch die Berechnung von Korrelationen und Überlappungsintegralen. Daher werden auch Partikelverfahren mit glatten Ansatzfunktionen, im allgemeinen Gauß-Funktionen, verwendet, jedoch bisher nur in Form der Liniemethode und ohne Fehlerkontrolle. Im Berichtszeitraum wurde zunächst für den einfacheren Fall der niederdimensionalen klassischen Liouville-Gleichung ein adapti-

ves Partikelverfahren entwickelt, das auf der Rothe-Methode basiert und vollständige Adaptivität und Fehlerschätzung sowohl für die Orts- als auch für die Zeitdiskretisierung bietet [11]. Damit ist das Verfahren in der Lage, die filigrane Struktur der exakten Lösungen zu reproduzieren, siehe Abbildung 2.10.

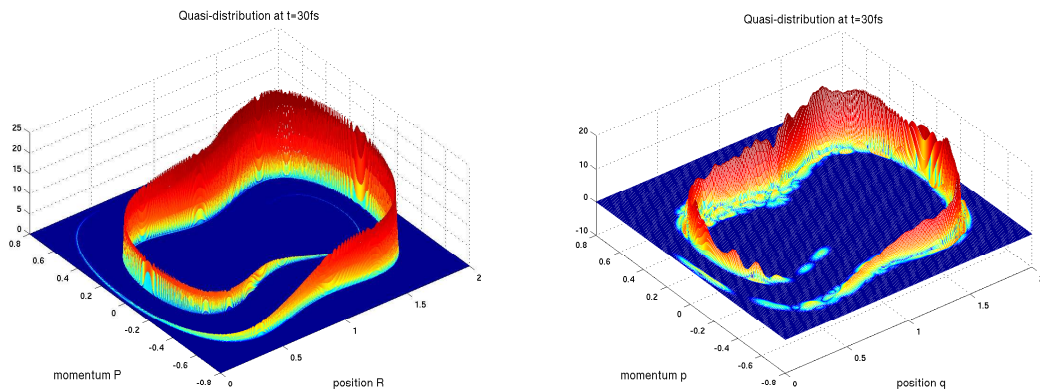


ABBILDUNG 2.10: Exakte Dichte (links) und mit adaptivem Partikelverfahren berechnete Dichte (rechts) nach 30fs.

### Computeralgebra für stöchiometrische Netzwerkanalyse (Karin Gatermann; Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft)

Die Stöchiometrische Netzwerkanalyse ist ein gutes Anwendungsgebiet für symbolisches Rechnen. In dieser Theorie beschäftigt man sich mit der Bestimmung von positiven stationären Lösungen, ihrer Stabilität sowie Hopf-Verzweigung von gewissen polynomiellen Differentialgleichungen. Dies sind die Differentialgleichungen mit Massenwirkungskinetik, die das zeitliche Verhalten von Konzentrationen der Chemikalien in chemische Reaktionen beschreiben. Ziel ist es, die Abhängigkeit von den Parametern und den gegebenen diskreten Strukturen, einem gerichteten Graphen und einem bipartiten Graphen [13], zu verstehen. Typischerweise wird ein Kegel untersucht und Konsequenzen für die Dynamik aus den Eigenschaften seiner minimalen Erzeuger gezogen. Fortschritte konnten erzielt werden, in dem wir dieses Vorgehen als Schnitt mit einer deformierten torischen Varietät interpretieren konnten. Die Gröbner-Basis des zugehörigen torischen Ideals wurde in [15] benutzt, um die Existenz von Hopf-Verzweigungen in einem Kalzium-Modell nachzuweisen. Weitere Beispiele sind die Elektrooxidation von Ameisensäure [14] und die autokatalytische Reaktion auf einer Metalloberfläche [12]. Innerhalb dieses Projekts entstand ein Programm [16], das in Maple implementiert wurde. Ein neues Resultat [17] liefert die Parametergebiete, in denen Multistationarität auftritt.

**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*, Springer, Texts in Applied Mathematics, vol. 42, 2002.
- [3] 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*, Proceedings of 9th Workshop on The Finite Element Method in Niomedical Engineering, Biomechanics and related Fields, Ulm, Germany, 2002
- [4] U. Nowak, A. Grah, M. Schreier: *Numerical Software for Simulation, Sensitivity Analysis and Parameter Estimation in Catalytic Gas Reactors*. Proceedings ACOMEN 2002
- [5] M. Schlegel, W. Marquardt, R. Ehrig, U. Nowak: *Sensitivity analysis of linearly-implicit differential-algebraic systems by one-step extrapolation*. Report 02-38, ZIB, 2002, submitted for publication in Appl. Num. Math.
- [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*. Chem. Eng. Sci. 57, 4354-4356 (2002)
- [8] B. Erdmann, J. Lang, R. Roitzsch: *KARDOS User’s Guide*. Report 02-42, ZIB, 2002
- [9] J. Lang, B. Erdmann: *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*, Numerical Heat Transfer: Applications, Vol. 42, No. 1, 107–119 (2002)
- [10] P. Deuffhard, U. Nowak, M. Weiser: *Affine Invariant Adaptive Newton Codes for Discretized PDEs*. Report 02-33, ZIB, 2002
- [11] I. Horenko, M. Weiser: *Adaptive Integration of Multidimensional Molecular Dynamics with Quantum Initial Conditions*. Report 02-29, ZIB, 2002
- [12] K. Gatermann: *Counting stable solutions of sparse polynomial systems in chemistry*. Contemporary Math. Volume 286, Symbolic Computation: Solving Equations in Algebra, Geometry, and Engineering, Editors: E. Green, S. Hoşten, R. Laubenbacher, V. Powers, AMS, Providence, Rhode Island, 53–69, 2001.

- [13] K. Gatermann, B. Huber: *A family of sparse polynomial systems arising in chemical reaction systems*. Journal of Symbolic Computation 33(3), 275-305, 2002.
- [14] M. Eiswirth, K. Gatermann, A. Sensse: Poster *Kinetic model for the electro-oxidation of formic acid Application of convex and toric geometry*. Gordon Research Conference on Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, 28.7-2.8.2002, Queen's College, Oxford, UK.
- [15] A. Sensse: *Algebraic methods for the analysis of Hopf bifurcations in biochemical network*. Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin, 2002.
- [16] K. Gatermann und A. Sensse: *Storch 1.0. A Maple package for mass action kinetics*. Siehe <http://www.zib.de/gatermann/software.html>.
- [17] K. Gatermann, M. Wolfrum: *Bernstein's 2. theorem and Viro's method for sparse polynomial systems in chemistry*. 2002/2003.

#### 2.2.4 Computergestützte Therapie- und Operationsplanung

Die computerunterstützte Therapie- und Operationsplanung bildete weiterhin einen Schwerpunkt bei den medizinisch orientierten Projekten. Fortgeführt wurden die Aktivitäten im Bereich der *computergestützten Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie*, bei der knochenverlagernde Eingriffe am *virtuellen Patienten* geplant und die Planungsergebnisse unter funktionalen und ästhetischen Aspekten präoperativ bewertet werden. Im Rahmen des auslaufenden SFB 273 wurden die weit gediehenen Arbeiten zur Entwicklung eines Planungssystems für die *regionale Hyperthermie* – ein Verfahren der Krebstherapie, bei dem Tumorgewebe durch kontrollierte Radiowelleneinstrahlung auf Temperaturen von 42 bis 44°C erwärmt wird - mit neuen Zielstellungen weiterverfolgt.

##### **Computergestützte 3D-Operationsplanung, Weichgewebe- und Mimiksimulation für die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie**

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

**Kooperationspartner:** Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Kantonsspital Basel, Klinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Schweiz sowie Center of Advanced Cranio-Maxillofacial Surgery am Klinikum rechts der Isar, Technische Universität München); Thomas Hierl (Universitätsklinikum Leipzig, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie und Plastische Chirurgie); Emeka Nkenke (Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg); Anders Westermarck (Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden)

Das Planungssystem wurde sowohl hinsichtlich der 3D-Gittergenerierung als auch der intuitiven Knochenschnittplanung erweitert. Dabei wurde ein Verfahren zur Kollisi-

onserkennung implementiert, das eine korrekte interaktive Verlagerung von Knochen-  
teilen unter Kontaktbedingungen ermöglichen soll. Zur Verbesserung der Patienten-  
aufklärung wurde ein Verfahren zur Texturprojektion implementiert, mit dem fotogra-  
fische Aufnahmen auf das 3D-Patientenmodell übertragen und auf der Hautoberfläche  
korrekt dargestellt werden können (Abbildung 2.11 rechts).

Bei der lokal-adaptiven Vergrößerung der Oberflächenmodelle werden material- und  
geometrieabhängige Parameter berücksichtigt, so daß Geweberegionen entsprechend  
ihrer räumlichen Ausdehnung und Materialbeschaffenheit mit einer ausreichenden An-  
zahl von Tetraederelementen gefüllt werden. Mittels *Streudaten-Interpolation* und ei-  
nem lokal gewichteten *Distanzfeld*-Ansatz werden die auf dem Oberflächenmodell  
vorgegebenen Kantenlängen in das zu füllende Volumen übertragen und bei der Te-  
traedergittergenerierung zur Platzierung innerer Knoten ausgewertet. Auf diese Art  
lassen sich geeignete anatomische 3D-Modelle für biomechanische Simulationen auf  
Basis unstrukturierter Volumengitter generieren [1].

Für die Knochenschnittplanung wurde ein Verfahren entwickelt, das es ermöglicht,  
Schnittlinien direkt auf dem 3D-Modell einzuzeichnen. Unterschiedliche Vorgehens-  
weisen lassen sich so schnell planen und bewerten (Abbildung 2.12). Aus geschlosse-  
nen Schnittkonturen können zudem Flächen generiert werden, die den Möglichkeiten  
eines chirurgischen Schnittwerkzeugs entsprechen und mit denen innere Strukturen  
geschnitten werden können [2].

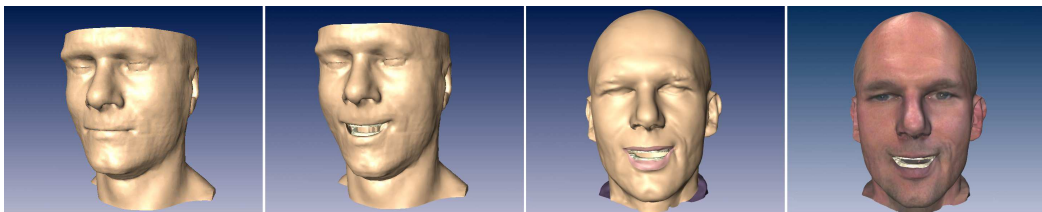


ABBILDUNG 2.11: Links: Aus MRT-Daten rekonstruiertes 3D-Modell mit  
muskelbasierter Mimiksimulation. Rechts: 3D-Oberflächen-Laserscan mit Mi-  
mik und applizierter Textur.

Das Planungssystem wurde an unterschiedlich komplexen Fragestellungen erprobt,  
um seine Praxistauglichkeit zu verbessern. Hierzu wurden in Kooperation mit den  
Kliniken in Basel, Leipzig, Erlangen-Nürnberg und Stockholm Operationsplanungen  
durchgeführt. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse hinsichtlich der funktionalen Reha-  
bilitation unter Berücksichtigung ästhetischer Gesichtspunkte wurden von den Ärzten  
als außerordentlich hilfreich eingestuft und im Rahmen des therapeutischen Konzeptes  
berücksichtigt. Mit dem Universitätsklinikum Leipzig wurde eine Kooperation verein-  
bart, die es ermöglicht, Weichgewebesimulationen mit post-operativen CT-Daten für  
eine Vielzahl von gut dokumentierten Fällen zu vergleichen [3]. Dies erlaubt es, das  
zugrunde liegende biomechanische Weichgewebemodell zu validieren und sukzessive  
zu verbessern [4, 5].



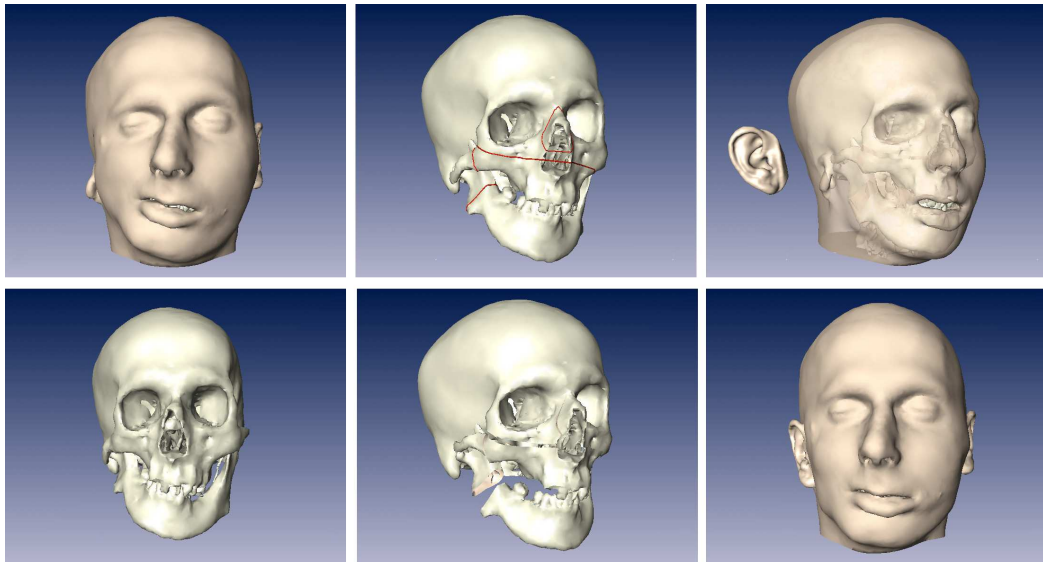


ABBILDUNG 2.12: Komplexe Schädelbildung mit hochgradiger Asymmetrie: Osteotomie- und Umstellungsplanung sowie Spiegelung und Anpassung des rechten Ohres zur Herstellung einer Ohreprothese.

Im Hinblick auf die angestrebte, netzverteilte kooperative Planung wurden am Kantonsspital Basel entsprechende technische Voraussetzungen geschaffen. Die Arbeiten zum BMBF-geförderten Projekt CoDiSP (*Collaborative Distributed Surgical Planning*) sind in Abschnitt 2.2.6 gesondert beschrieben.

Die Simulation individueller Gesichtsmimiken auf Basis eines anatomisch korrekten, muskelbasierten Modells wurde ebenfalls erfolgreich weitergeführt [6, 7, 8]. Simulationsergebnisse ließen sich auch auf andere Patientenmodelle übertragen, so daß erstmals im Rahmen der Chirurgieplanung nicht nur eine Abschätzung der post-operativen statischen sondern auch der dynamischen Gesichtsform gezeigt werden konnte (Abbildung 2.11). Die Simulation von Muskelaktivitäten und deren Auswirkung auf das Gesicht ist insbesondere für die plastische Chirurgie von großer Bedeutung, wo z.B. im Falle von partieller Gesichtslähmung (*facialis paresis*) einzelne Muskeln re-energiert werden können, um eine symmetrische Gesichtsform herzustellen [9].

### Planung am kombinierten MR-Hyperthermie-System

**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:** DFG, Sonderforschungsbereich 273, "Hyperthermie: Methodik, Klinik

und Biologie”

Durch die Einführung eines kombinierten Hyperthermiegerätes, bestehend aus einem Magnetresonanz-Tomographen (1.5 Tesla) und einem Hyperthermie-Applikator des Typs Sigma-Eye (siehe Jahresbericht 2001), hat sich das Aufgabengebiet des Planungssystems HyperPlan um das *Online-Monitoring* der Behandlung erweitert. Dies umfasst Verfahren zur Aufbereitung der gewonnenen MR-Daten, zur Korrektur von spezifischen Artefakten sowie zur Gewinnung von Temperatur- und Perfusionsinformationen. Zusammen mit numerischen Methoden der Parameter-Identifikation eröffnen diese die Möglichkeit zur *Online-Nachoptimierung* der Behandlungsparameter.

Das Planungssystem wurde um eine Reihe von Funktionen erweitert, die für die Verarbeitung von MR-Daten von Bedeutung sind: Mit unterschiedlichen Orientierungen und Positionen aufgenommene Schnittbilder können nun flexibel und korrekt eingelesen werden. Dies ermöglicht u.a. eine schnelle Kontrolle der Patientenlagerung zu Beginn der Behandlung durch wenige, unterschiedlich orientierte Übersichtsaufnahmen. Zeitserien von medizinischen Bilddaten, wie sie mit modernen Scannern in zunehmendem Maße anfallen, können nun eingelesen werden, und die Zeit kann als zusätzlicher Parameter in die Auswertung der Bilddaten einbezogen werden. Sättigungseffekte in einzelnen Schichten können durch Angleichung der Grauwertistogramme benachbarter Schichten korrigiert werden. Nach solch einem Grauwertausgleich können Fett- und Muskelgewebe in MR-Daten weitgehend automatisch mittels eines Schwellwertverfahrens getrennt werden.

Das Planungssystem erlaubt ein Temperatur-Monitoring für verschiedene MR-Messverfahren. Für T1-gewichtete Messungen oder Messungen der Diffusion werden Intensitäts-Änderungen in Temperatur-Änderungen umgerechnet, für Messungen nach der PRF-Methode ergibt sich die Temperaturdifferenz aus einer Phasen-Änderung. Die benötigten Parameter wurden durch Phantom-Messungen bestimmt. Eine Schwierigkeit bei der Temperaturmessung mittels MR ist, dass die meisten in Frage kommenden Messmethoden nicht nur auf Temperaturänderungen, sondern auch auf Veränderungen der Durchblutung des Gewebes ansprechen. Für eine zuverlässige Bestimmung der Temperatur muss daher auf Methoden der Parameteridentifizierung (siehe nachfolgendes Projekt) zurückgegriffen werden.

Um zwischen Temperatur- und Perfusionsänderungen unterscheiden zu können, wird vor und nach der Behandlung eine unabhängige Perfusionsmessung mittels Kontrastmittel durchgeführt. Das Planungssystem wurde um ein Modul zur Auswertung dieser Perfusionsmessungen erweitert. Die Perfusion wird aus einer MR-Messung mit einer speziellen MR-Sequenz bestimmt: entweder über den initialen Anstieg der Signalintensität (Perfusionsindex) oder durch Entfaltung des zeitlichen Signalverlaufs mit der gemessenen Perfusion in einer zuführenden Arterie; die Entfaltung wird mittels einer Singulärwertzerlegung berechnet.

Mit dem Planungssystem wurde eine retrospektive Simulationsstudie für 14 Patien-

ten mit einem Rektum-Karzinom durchgeführt, die an der Phase-3-Studie im Hyperthermie-Ast teilnahmen. Diese Patienten waren alle noch mit dem weniger wirksamen Applikator Sigma-60 behandelt worden. Es ergab sich eine hohe Korrelation der 'Hyperthermierbarkeit', wie sie sich aus der Simulation ergibt, mit dem klinischen Ergebnis. Für sechs der acht Patienten mit dem klinischen Ergebnis 'no change' sagte die Simulation eine schlechte Hyperthermierbarkeit mit dem verwendeten Gerät voraus. Umgekehrt war unter den laut Simulation schlecht hyperthermierbaren Patienten nur einer mit dem Ergebnis 'partial response'. In künftigen Studien zur Wirksamkeit der regionalen Hyperthermie muß also die mittels Simulation vorher abgeschätzte Hyperthermierbarkeit oder die mittels nicht-invasiver Temperaturmessung tatsächlich erfolgte Erwärmung berücksichtigt werden. Eine Publikation hierzu ist in Vorbereitung [10].

### **Zusammenfassung weiterer Aktivitäten**

**Erweiterte SQP-Verfahren zur Temperaturmessung** (Martin Weiser; Kooperation: Stefan Volkwein, Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich)

Bei der Temperaturmessung mit dem kombinierten MR-Hyperthermie-Applikator macht sich störend bemerkbar, daß in die Meßwerte nicht nur die Temperatur eingeht, sondern auch die Durchblutung des Gewebes. Darüber hinaus sind die Meßwerte meist stark verrauscht. Unter der Annahme, daß die Modellierung der Wärmeverteilung im Körper und die berechnete Energieaufnahme des Gewebes quantitativ korrekt sind, lassen sich mit Verfahren der Parameteridentifikation die Werte von Temperatur und Durchblutung aus den Meßwerten extrahieren. In diesem Projekt werden erweiterte SQP-Verfahren [11] zur Lösung des inversen Problems untersucht. Die Tikhonov-Regularisierung muß dabei zulässige Unstetigkeiten der Durchblutungsstärke an Gewebegrenzen berücksichtigen. Außer den MR-Meßdaten können auch noch genaue Punktmessungen der Temperatur mit Thermosonden einbezogen werden. In ersten Versuchen konnten Temperatur und Perfusion auch aus verrauschten Daten zufriedenstellend rekonstruiert werden, erwartungsgemäß allerdings nur in den Bereichen, in denen Meßdaten vorlagen.

**Therapieplanung in der Neurochirurgie** (Stefan Zachow, Hans-Christian Hege, Peter Deufflhard; Kooperation: Ernst-Johannes Haberl, Neurochirurgische Klinik der Humboldt-Universität zu Berlin, Charité – Campus Virchow-Klinik)

Im Berichtszeitraum erfolgten erste Untersuchungen zur computergestützten Planung operativer Korrekturen frühkindlicher Schädelneurogenese aufgrund vorzeitig verknöchender Schädelnähte (Kraniosynostosen). Eine beabsichtigte gemeinsame Studie hat das Ziel, mittels dreidimensionaler Rekonstruktion aus MRT-Daten die statistischen Schädelformvarianten knochengesunder Kinder im ersten Lebensjahr zu erfassen und zu analysieren. Kernziel ist die Etablierung quantifizierbarer Planungskriterien zur chirurgischen Schädelumformung sowie die Bereitstellung eines 3D-Atlas *normalgeformter* frühkindlicher Schädelmodelle aus dem sich physische Umformungsmodelle für den individuellen Einsatz im OP erzeugen lassen.

**Mikrovaskuläre Thermoregulationsmodellierung** (Peter Deuffhard, Reinhard Hochmuth; Förderung: DFG–Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1)

Regionale Hyperthermie ist ein seit vielen Jahren am ZIB laufendes Projekt. Dabei wird Wärme im Inneren des Körpers eines Patienten mittels Radioantennen erzeugt. Zu diesem Zweck muß die Wärmeverteilung sorgfältig quantitativ modelliert werden. Seit einer 1948 erschienen Arbeit des Biophysikers Pennes wird als Modell eine einfache Diffusionsgleichung mit einem Helmholtz-Term verwendet. Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, das zugrundeliegende Multiskalenproblem als solches direkt zu behandeln: (a) dreidimensionale Makromodelle für große Blutgefäße, (b) eindimensionale Mesomodelle für mittelgroße Adern und (c) homogenisierte Mikromodelle für Gebiete mit kleinen Kapillargefäßen. Die Situation ist in Abbildung 2.13 dargestellt. Langfristig sollen die drei Modelle schließlich zu einem heterogenen Gesamtmodell zusammengeführt werden.

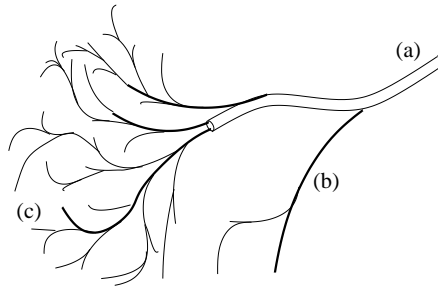


ABBILDUNG 2.13: Vaskuläres Multiskalenmodell: (a) große Adern (3D), (b) mittelgroße Adern (1D), (c) Kapillargefäße (Homogenisierung)

In einem ersten Schritt wurden anisotrope Diffusionsgleichungen analytisch mittels Homogenisierung aus periodischen Mikroskalenmodellen hergeleitet [12]. Von zentraler Bedeutung erwies sich hierbei die korrekte Skalierung in der Modellierung des Blut-Gewebe Übergangs durch inhomogene Robin-Randbedingungen. Die Anisotropie in den homogenisierten Gleichungen reflektiert die lokale Geometrie der kapillaren Blutgefäße. Im Hinblick auf eine spätere Integration unserer homogenisierten Modelle in ein heterogenes Gesamtmodell wurden zusätzlich asymptotische Abschätzungen für die Korrektoren erster Ordnung bewiesen.

### Publikationen

- [1] H.-C. Hege, H. Schirmacher, M. Westerhoff, H. Lamecker, S. Prohaska, S. Zachow: *From Image Data to Three-Dimensional Models: Case Studies on the Impact of 3D Patient Models*. In: Proc. of the Japan Korea Computer Graphics Conference (JKCGC), Kanazawa, Japan (2002)

- 
- [2] S. Zachow, E. Gladilin, A. Trepczynski, R. Sader, H.-F. Zeilhofer: *3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery: Experiences and Results of Surgery Planning and Volumetric Finite-Element Soft Tissue Prediction in Three Clinical Cases*. In: H.U. Lemke, et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Springer-Verlag, pp. 983–987 (2002)
- [3] T. Hierl, G. Wollny, S. Zachow, R. Klöppel: *Visualisierung von Knochen und Weichteilveränderungen in der Distractionsosteogenese des Mittelgesichtes*. 10. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Schädelbasischirurgie, Heidelberg, November 8.–9. (2002), ISSN: 1619-2745 / 1827
- [4] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege,: *Adaptive nonlinear elastic FEM for realistic soft tissue prediction in craniofacial surgery simulations*. SPIE Medical Imaging, San Diego, USA (2002)
- [5] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege,: *A nonlinear soft tissue model for craniofacial surgery simulations*. In: *Modelling and Simulation for Computer-Aided Medicine and Surgery*, INRIA Rocquencourt, Nov. 12–15th (2002)
- [6] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege,: *Shape-based modeling approach for the estimation of individual facial mimics in craniofacial surgery planning*. SPIE Medical Imaging, San Diego, USA (2002)
- [7] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege,: *Biomechanisches Modell zur Abschätzung der individuellen Gesichtsmimik*. In: M. Meiler, D. Saupe, F. Krugel, H. Handels, T. Lehmann (eds.), *Proc. “Workshop Bildverarbeitung für die Medizin” (BVM)*, Dresden, Germany, Springer-Verlag, pp. 25–28 (2002)
- [8] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Biomechanical modeling of individual facial emotion expressions*. In: *Proc. of Visualization, Imaging, and Image Processing (VIIP)*, Malaga, Spain, pp. 7–11 (2002)
- [9] S. Zachow, E. Gladilin, H.-C. Hege, P. Deuffhard,: *Towards Patient Specific, Anatomy Based Simulation of Facial Mimics for Surgical Nerve Rehabilitation*. In: H.-U. Lemke, et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Springer-Verlag, pp. 3–6 (2002)
- [10] P. Deuffhard, M. Seebass, J. Gellermann, P. Wust, P. Schlag: *Correlation between Simulation Results and Clinical Outcome for Regional Hyperthermia of Rectum Carcinomas – Implications for Clinical Studies*, in Vorbereitung.
- [11] S. Volkwein und M. Weiser: *Affine invariant convergence analysis for inexact augmented Lagrangian-SQP methods*, *SIAM J. Control Optim* **41** (2002), 875–899.

- [12] P. Deuffhard, R. Hochmuth: *Multiscale Analysis of Thermoregulation in the Human Microvascular System*, Report 02-31, ZIB, 2002.

### 2.2.5 Biomedizinische Bildverarbeitung

Im Zentrum der Aktivitäten stand die modellbasierte Segmentierung auf Basis statistischer 3D-Formmodelle. Einen zweiten Schwerpunkt bildete die Handhabung extrem großer Datensätze und deren Segmentierung, Skelettierung sowie Visualisierung.

#### **Automatische Lebersegmentierung auf Basis eines statistischen 3D-Formmodells**

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

**Kooperationspartner:** Thomas Lange, Sebastian Eulenstein, Johanna Gellermann, Peter Wust, Peter Schlag (Charité, HU Berlin)

**Förderung:** DFG, Sonderforschungsbereich 273, "Hyperthermie: Methodik, Klinik und Biologie"

Zur Optimierung chirurgischer Eingriffe ist eine patientenspezifische Planung nötig. Ziel dieses Projektes ist ein System für die computergestützte präoperative Planung bei Leberresektionen. Eine Grundlage für den Einsatz einer solchen Planung in der klinischen Routine ist die automatische Segmentierung der Lage und Form der Leber aus CT- oder MR-Daten.

Als robuste Methode zur automatischen Segmentierung dreidimensionaler medizinischer Bilddaten haben sich Verfahren basierend auf statistischen Formmodellen erwiesen. Eine Voraussetzung für die Anwendung eines solchen Verfahrens ist die Erstellung eines statistischen 3D-Formmodells.

Hierzu wurde zunächst eine Trainingsmenge bestehend aus 43 Leberdatensätzen mit Amira interaktiv segmentiert und triangulierte Oberflächen des Lebergewebes rekonstruiert. Zur Bestimmung einer mittleren Form und der charakteristischen Abweichungen vom Mittel durch eine Hauptachsentransformation ist die Berechnung von Punkt-korrespondenzen innerhalb der Trainingsmenge notwendig. Die Oberflächen werden dazu entlang Linien hoher Krümmung in Flächenstücke zerlegt, die topologisch einer Kreisscheibe gleichen. Durch Abbildung korrespondierender Flächenstücke auf gemeinsame Kreisscheiben kann dann eine Korrespondenz zwischen den verschiedenen Oberflächen hergestellt werden [1].

Zur Segmentierung wird das so erzeugte Modell initial in den zu segmentierenden Bilddaten plaziert. Durch Analyse der Grauwertprofile normal zur Oberfläche des Modells wird eine Deformation des Modells berechnet. Diese wird dann auf eine 'erlaubte' Form des Modells projiziert. Dieser Schritt macht die Segmentierung robust. Die Adaption des Modells wird iterativ fortgesetzt, bis keine Verbesserung mehr stattfindet. Zur Evaluation dieses Verfahrens wurde eine Stichprobe von 33 CT-Datensätzen der Leber segmentiert. Als 'gold standard' galt hierbei stets die manuelle Segmen-

tierung der Datensätze. Zunächst wurde untersucht, wie gut ein Lebermodell, das die Daten der Trainingsmenge nicht enthält, die Formen der Stichprobe approximiert. Die Minimierung des symmetrischen mittleren quadratischen Flächenabstandes ergab eine über die Stichprobe gemittelte Abweichung von 1.9 mm. Als Test für die Güte der Anpassungsstrategie im Segmentierungsprozess wurden die Datensätze der Stichprobe mit einem Modell segmentiert, das alle Zielformen enthielt (leave-it-in Test). Es ergab sich eine mittlere Abweichung von 1.1 mm. Die Segmentierung der Datensätze mit einem Modell, das die Zielformen nicht enthielt (leave-it-out Test), ergab eine Abweichung von 2.3 mm [2].

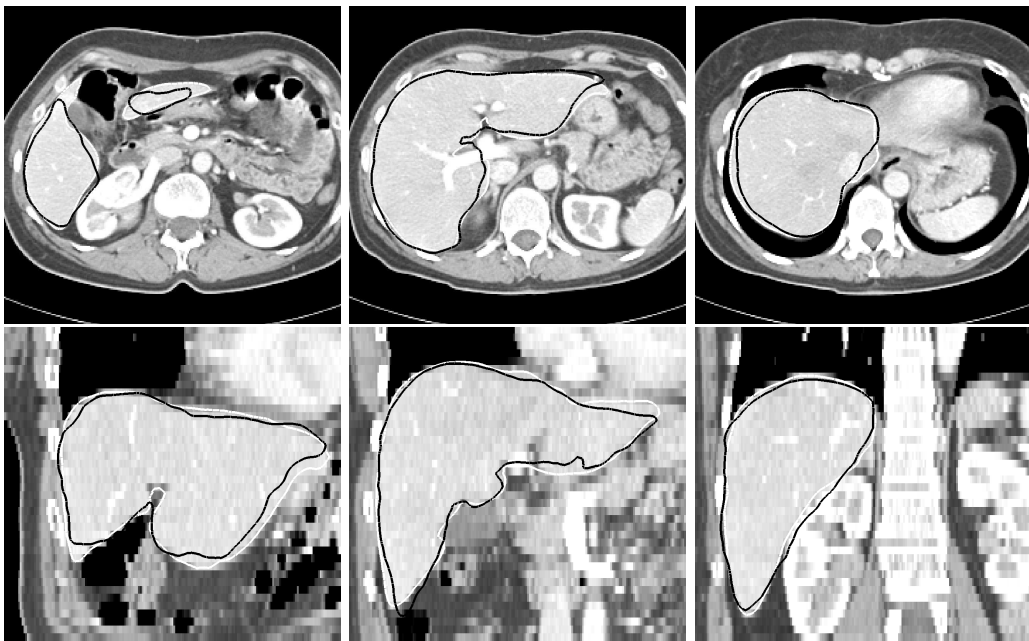


ABBILDUNG 2.14: Qualitativer Vergleich einer automatischen (dunkle Umrandung) mit einer manuellen (helle Umrandung) Segmentierung bei einer mittleren Abweichung von 2 mm, in axialer und koronaler Ansicht.

Das Ergebnis zeigt, daß eine Verbesserung der Ergebnisse durch die Erweiterung des Modells zu erwarten ist. Der Teilraum der zugelassenen Formen scheint jedoch noch zu eingeschränkt zu sein (siehe Abbildung 2.14).

Eine mathematisch vertiefte Behandlung des Problems der Korrespondenzfindung und des Modelladaptionprozesses soll im Rahmen des DFG Forschungszentrums “Mathematik für Schlüsseltechnologien” durchgeführt werden (Teilprojekt F2).

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Analyse der Knochenfeinstruktur** (Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege; Kooperation: Wolfgang Gowin, Dieter Felsenberg, Michael Giehl, Peter Saporin und

Arndt Boshof, (Osteoporoseforschungsgruppe, Universitätsklinikum Benjamin Franklin, Berlin), Jürgen Kurths und Alexei Zaikin (Arbeitsgruppe Nichtlineare Dynamik an der Universität Potsdam), 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))

Im Projekt ‘2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity’, das von der europäischen Weltraumagentur ESA für weitere 3 Jahre finanziert wird, werden neue Methoden entwickelt, um die Knochenstruktur und pathologische Veränderungen zu quantifizieren. Aufbauend auf Vorarbeiten der Kooperationspartner zu Komplexitätsmaßen für CT-Schnitte in 2D wurden Analysewerkzeuge geschaffen und im Rahmen einer größer angelegten Studie angewendet [3, 4].

Die skalenabhängigen Komplexitätsmaße werden derzeit für hochaufgelöste 3D-Bild-daten ( $\approx 20\mu$  Auflösung) erweitert. Um die Datenbasis für die Entwicklung zu erweitern, wurde in Zusammenarbeit mit der Universität Potsdam ein statistisches Modell entwickelt, das den Knochenabbau simuliert [5].

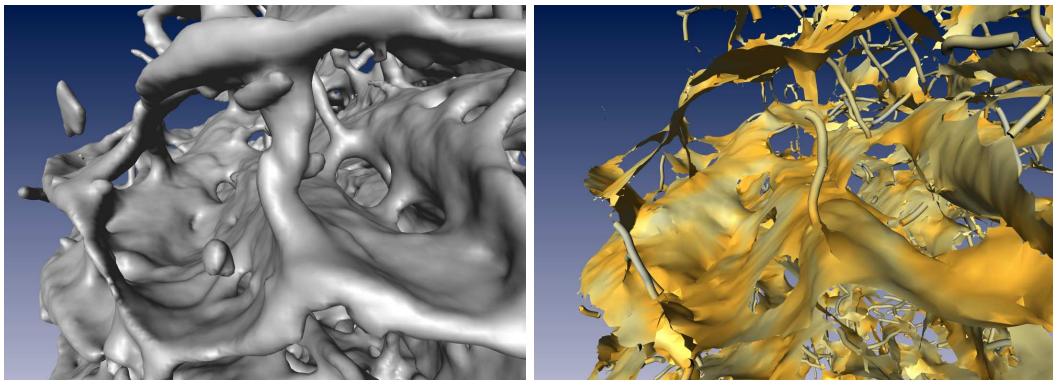


ABBILDUNG 2.15: Ausschnitt aus dem Knocheninneren. Links: Isofläche zwischen kalkhaltigem Gewebe und Mark für Mikro-CT-Daten. Rechts: Extrahiertes Skelett zur schnellen Visualisierung.

Eine weitere Problematik ist die Visualisierung der hochkomplexen Feinstruktur von Knochen. Die interaktive Darstellung des Übergangs zwischen kalkhaltigem Knochen und Mark mittels triangulierter Isoflächen ist nur für Teilausschnitte möglich, da diese für eine gesamte Biopsie aus mehreren Millionen Dreiecken bestehen (siehe Abbildung 2.15, links). Eine schnelle Darstellung größerer Bereiche wird möglich, wenn die Struktur auf wesentliche Elemente reduziert wird. Dazu wurde ein Skelettierungsverfahren entwickelt, das den Knochen auf Mittelflächen und Mittellinien reduziert [6]. Basierend auf der geodätischen Entfernung entlang der Voxeloberfläche des Knochens werden Teile der Mittelfläche (das ‘Skelett’) der untersuchten Struktur als Voxelfläche gefunden. In einem zweiten Schritt werden daraus Dreiecksflächen und Linien erzeugt, die zur Visualisierung noch vereinfacht werden können (Abbildung 2.15, rechts).



### **Alignierung großer mikroskopischer Bildstapel und 3D-Rekonstruktion**

**Bearbeitet von:** Detlev Stalling, Gregor Wrobel, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Sabine Gubatz, Patrick Schweizer (Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung, Gatersleben)

**Förderung:** BMBF-Verbundprojekt Bioinformatics Center Gatersleben-Halle

Im Rahmen des Bioinformatics Center Gatersleben-Halle wird in der Nachwuchsgruppe “Erkennung und Analyse räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster” die Entwicklung von Pflanzensamen rechenstechnisch untersucht. Auf Basis des am ZIB entwickelten 3D-Visualisierungssystems Amira werden dazu Verfahren entwickelt, die eine 3D-Rekonstruktion der Pflanzensamen aus hochaufgelösten mikroskopischen Schnittbildern ermöglichen. Die einzelnen Schnittbilder müssen zunächst gegeneinander ausgerichtet werden. Anschließend sind die Bilder zu segmentieren, so daß dann ein 3D-Modell rekonstruiert werden kann. Nachdem ein solches Modell erstellt wurde, muss es leicht möglich sein, eventuelle Fehler in der Alignierung bzw. der Segmentierung zu korrigieren.

Die in Amira bereits vorhandenen Methoden wurden zu diesem Zweck weiterentwickelt. Insbesondere ist es nun möglich, die Alignierung auf sehr großen Bildstapeln durchzuführen, die nicht vollständig in den Hauptspeicher geladen werden können. Typischerweise müssen mehrere hundert Bilder mit einer Auflösung von mindestens 1.600 x 1.200 Pixeln verarbeitet werden, so daß sich ein Datenvolumen von einigen Gigabyte ergibt. Für die Alignierung selbst wurde ein neuartiges automatisches Verfahren entwickelt, welches die interessierenden Strukturen zunächst vom Hintergrund trennt und dann die resultierenden Konturen gegeneinander ausrichtet. Anschließend wird mit Hilfe eines Multiresolutionsansatzes die euklidische Transformation berechnet, durch welche die Pixeldifferenz zwischen zwei benachbarten Bildern minimiert wird. Im weiteren Projektverlauf soll zum einen die Segmentierung und 3D-Rekonstruktion von sehr großen Bildstapeln verbessert werden und zum anderen die Rekonstruktion zeitlich veränderlicher Modelle untersucht werden.

### **Publikationen**

- [1] H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß, *A Statistical Shape Model for the Liver*, Proceedings of MICCAI 2002, pp. 422–427, 2002.
- [2] H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß, *Segmentation of the liver using a 3D statistical shape model*, Submitted to IEEE Transactions on Medical Imaging.
- [3] W. Gowin, P. Sapiro, D. Felsenberg, J. Kurths, A. Zaikin, S. Prohaska, H.-C. Hege: *Regional Structural Skeletal Discordance Assessed by Measures of Complexity*. Poster at the IOF World Congress on Osteoporosis 2002, Lisbon.

- [4] W. Gowin, P. Saporin, S. Prohaska, H.-C. Hege, D. Felsenberg: *Femoral Neck Fractures: Reasons for the Most Common Location of Fractures*. Acta Orthop. Scand. (Suppl. 304), vol. 73, p. 26, 2002.
- [5] A. Zaikin, P. Saporin, S. Prohaska, J. Kurths, W. Gowin, *Bone Modeling and Structural Measures of Complexity*. Journal of Gravitational Physiology, vol. 9, pp. 175–176, 2002.
- [6] S. Prohaska, H.-C. Hege, *Fast Visualization of Plane-Like Structures in Voxel Data*, Proceedings of IEEE Visualization 2002, p. 29–36, 2002.

### 2.2.6 Virtuelle Labors

Unter *virtuellen Labors* verstehen wir integrierte anwendungsspezifische Softwaresysteme, die es erlauben, auf Basis von Daten aus Experiment und Simulation Probleme aus Teilgebieten der Medizin, Biologie, Biochemie, Chemie und Physik zu lösen. Die Entwicklung derartiger Systeme wurde in den vergangenen Jahren erfolgreich zu einem Arbeitsschwerpunkt in der Abteilung für Wissenschaftliche Visualisierung ausgebaut. Im folgenden werden exemplarisch drei Systeme herausgestellt, an denen im Jahr 2002 gearbeitet wurde, nämlich virtuelle Labore für die Biochemie, die Astrophysik und die Landschaftsvisualisierung.

#### Virtuelles Molekül-Labor

**Bearbeitet von:** Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Frank Cordes, Timm Baumeister, Maro Bader, Alice Boit, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** Forschungsverbund RiNA GmbH, AG Christof Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik), BCB-Gruppe ‘Alignment and threading on massively parallel computers’ (ZIB, Thomas Steinke), BCB-Gruppe ‘3D Structural Data Mining and Quality Management’ (HU-Berlin, Charité, Robert Preißner)

**Förderung:** Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB), gefördert vom BMBF

Das *virtuelle Moleküllabor* basiert auf dem am ZIB entwickelten 3D-Visualisierungssystem Amira. Es wurde durch neue Datentypen und Module so erweitert, daß Moleküle visualisiert und analysiert, Moleküloberflächen berechnet, oder verschiedene Molekülkonformationen untersucht und verglichen werden können. All diese Erweiterungen wurden in der ersten Hälfte des Berichtszeitraumes komplett überarbeitet und unter dem Namen *AmiraMol* als Erweiterungspaket für Amira für externe Nutzer bereitgestellt. Außerdem wurde an folgenden Themen gearbeitet:

**MOLEKÜLOBERFLÄCHEN.** Um Moleküloberflächen genauer untersuchen zu können, wurde eine neues Visualisierungsmodul entwickelt, das es ermöglicht, Flächen entsprechend ihrer Zugehörigkeit zu Atomen einzufärben, oder durch Mausclick auf die

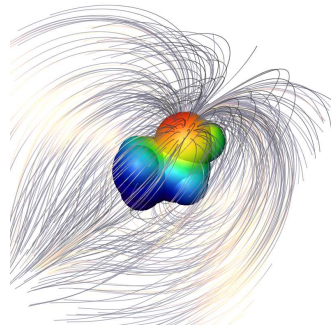


ABBILDUNG 2.16: Potential auf der Grenzfläche (berechnet mit Hilfe der Boundary Element Methode) und elektrostatisches Feld von Äthanol in Wasser.

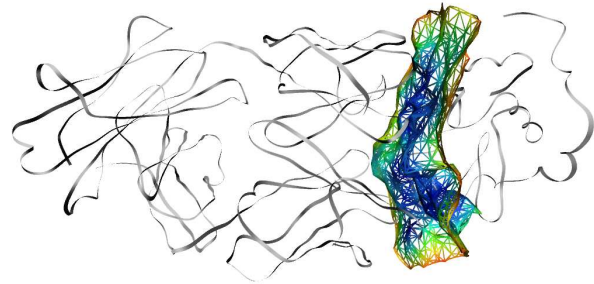


ABBILDUNG 2.17: Molekulare Grenzfläche zwischen einem Antikörper und einem Antigen (PDB-Eintrag: 3hfm); Farbkodierung: Abstand der Grenzfläche zu den Molekülen.

Oberfläche Informationen über den entsprechenden Molekülbereich zu erhalten.

**BERECHNUNG DER SOLVATISIERUNGSENERGIE VON MOLEKÜLEN.** Unter Verwendung der analytischen und triangulierten Moleküloberflächen wurde eine Methode zur Berechnung der Solvatisierungsenergie von Molekülen implementiert. Der elektrostatische Anteil der Solvatisierungsenergie wird über die Poisson-Gleichung mittels einer Boundary-Element-Methode approximiert (Abbildung 2.16), wobei als Grenzfläche zwischen den Dielektrika die van-der-Waals-Oberfläche dient. Die Gesamtsolvatisierungsenergie von Biomolekülen wird durch Summation der einzelnen Beiträge jedes Atoms ('atomic solvation parameters') zum Flächeninhalt der Solvent Accessible Surface berechnet.

**MOLEKULARE GRENZFLÄCHEN.** Will man die Interaktion von Molekülen untersuchen, ist es interessant, die Fläche zu bestimmen, die zwischen den Molekülen liegt und gleich weit von beiden entfernt ist (vgl. Abbildung 2.17). Für die Berechnung dieser Grenzfläche haben wir einen gitterbasierten Ansatz gewählt, der zunächst mit einer Breitensuche jedem Atom die Gitterpunkte zuordnet, die ihm am nächsten liegen. Aus dem daraus generierten Label-Feld wird mit Hilfe des GMC-Algorithmus [1] ein initiales Dreiecksgitter erstellt, das anschließend durch Verschieben vorhandener und Einfügen neuer Punkte verfeinert wird. Eine aussagekräftige Visualisierung ergibt sich, wenn Flächenbereiche entsprechend der Zuordnung zu Atomen eingefärbt werden. Um Linien, die solche Flächenbereiche trennen, klar erkennbar zu machen, müssen die Bereiche in denen Flächenstücke unterschiedlicher Atome aneinanderstoßen, lokal verfeinert werden.

**HOMOLOGY MODELING VON RNA-MOLEKÜLEN.** Es wurde mit der Entwicklung eines Verfahrens begonnen, das aus RNA-Sequenzen durch Vergleich mit Strukturdaten bekannter RNA-Moleküle 3D-Modelle erstellt. Hierzu wird zunächst ein ex-

ternes Sekundärstrukturalignment mit RNA-Molekülen aus einer Datenbank durchgeführt. Neue Template-Moleküle, z.B. aus der PDB (Protein Data Bank), werden auf ihre Sekundärstruktur hin untersucht und in eine eigene Template-Bibliothek geschrieben. Wurde ein geeignetes Template-Molekül gefunden, werden konservierte Bereiche übernommen, in ein neues Backbone überführt und die verbleibenden Loops aus einer Loop-Datenbank nachmodelliert. Die Visualisierung von Helizes und Loop-Bereichen erfolgt durch Darstellung des strickleiterartigen Backbones der RNA, wobei die Möglichkeit besteht, Basenpaare nach verschiedenen Kriterien einzufärben (Zugehörigkeit zu Sekundärstrukturelementen, kanonische und nichtkanonische Baseninteraktion, Wasserstoffbrücken). Sequenzkonservierte Basenpaare können von positionell erhalten gebliebenen farblich unterschieden werden. Der bislang entwickelte Teil des Verfahrens wird durch ein Amira-Modul bereitgestellt.

**ANALYSE VON KONFIGURATIONSMENGEN.** Die Werkzeuge zur dynamisch-statistischen Analyse von Konfigurationsmengen wurden im Hinblick auf dynamische Konformationsanalyse erweitert. Eine im Projekt *Konformationsdatenbanken für das virtuelle Screening* (Abschnitt 2.2.1) entwickelte Methode zur hierarchischen Zerlegung metastabiler Freiheitsgrade [2] kann nun auch in Amira durchgeführt werden.

Weiterhin kann auf einfache Weise mit verschiedenen Zerlegungen experimentiert werden. Jede Zerlegung kann mit Hilfe von Perron-Cluster-Analyse auf metastabile Mengen untersucht werden. Sowohl innerhalb als auch außerhalb von Amira erzeugte Zerlegungen des Konfigurationsraums können anhand von Histogrammen einzelner Freiheitsgrade sowie Korrelationshistogrammen mehrerer Freiheitsgrade analysiert werden. Durch die Darstellung der Zerlegungen als Konfigurationsmengen kann die gesamte Funktionalität zur Konformationsvisualisierung [3] verwendet 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; John Shalf, Lawrence Berkeley National Laboratory, (LBL), Berkely, San Francisco (Kalifornien, USA); Donna Cox, National Center for Supercomputing Applications (NCSA), Urbana-Champaign (Illinois, USA); Tom Abel, Pennsylvania State University (PSU), USA

**Förderung:** Max-Planck-Gesellschaft, BMBF/DFN

In der Arbeitsgruppe "Numerische Relativitätstheorie" des Kooperationspartners AEI wird derzeit intensiv an Verfahren zur Berechnung des letzten vollständigen Orbits zweier Schwarzer Löcher vor deren Verschmelzung gearbeitet. Bei diesem Vorgang werden Gravitationswellen von besonderer Intensität abgestrahlt. Dies könnte beim noch ausstehenden experimentellen Nachweis der Wellen helfen. Außerdem treten nichtlineare Effekte auf, die Hinweise auf eventuelle Grenzen der Allgemeinen Relativitätstheorie liefern könnten. Bis Ende 2002 konnte bereits ein  $3/4$  Orbit im Computer simuliert werden.

Mit den am ZIB entwickelten neuen Visualisierungsmethoden für Tensorfelder, insbesondere symmetrische Tensorfelder auf dreidimensionalen Mannigfaltigkeiten, ist es nun möglich, die primären Rechengrößen in der numerischen Relativitätstheorie nicht nur komponentenweise zu visualisieren. Die neuen Visualisierungsverfahren reichen von der quantitativen Analyse jedes einzelnen Datenpunktes bis hin zu eher qualitativ orientierten Darstellungen von grossen Datensätzen. Die aktuellen Probleme des ‘Grid-Stretching’ – ein kleiner Koordinatenabstand wird im physikalischen Raum extrem oder sogar unendlich gestreckt und verursacht dadurch numerische Instabilitäten – und von Kausalitätsbeziehungen zwischen Gitterpunkten – aus einem Schwarzen Loch kommt bekanntlich nichts heraus, weshalb auch die numerischen Algorithmen entsprechend formuliert werden müssen – können mit diesen Visualisierungsverfahren nun gründlicher untersucht werden. Manche dieser Verfahren bieten sogar die Möglichkeit, zwei Tensorfelder gleichzeitig darzustellen, entsprechen also einer instantanen Visualisierung von bis zu 12 unabhängigen Größen an jedem Gitterpunkt (siehe Abbildung 2.18).

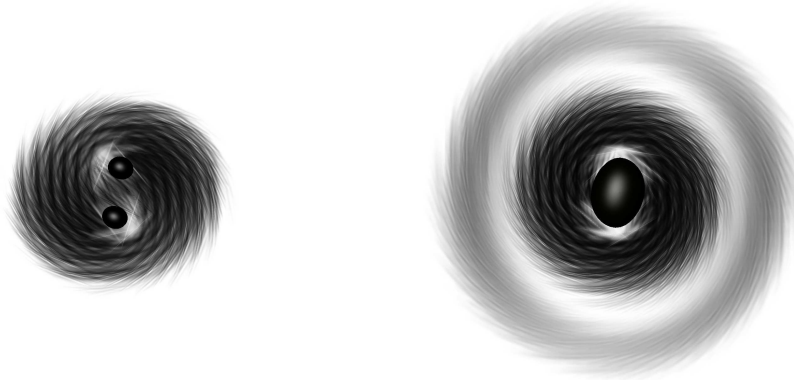


ABBILDUNG 2.18: Visualisierung des metrischen Tensorfeldes zweier verschmelzender Schwarzer Löcher: die Farbgebung (hier in Schwarzweiss nur partiell darstellbar) der filamentartigen Strukturen zeigt die Intensität der ‘Streckung’ von Gitterpunkten im Raum an, während ihre Orientierung die noch fehlende Richtungsinformation liefert.

Die bislang größte numerische Simulation dieser Art wurde im März 2002 auf einem Linux-Cluster am National Center for Supercomputing Applications (NCSA) durchgeführt. Die Visualisierung der dabei angefallenen 600 GB Rohdaten stellte eine neue Herausforderung für die Visualisierungsumgebung Amira dar. Die mit unseren Verfahren erzeugten Bildsequenzen wurden vom US-TV Sender Discovery Channel und für die weltweit ausgestrahlte Dokumentationssendung ‘The Unfolding Universe’ verwendet.

Der zweite Teil des Projektes beschäftigt sich mit der Visualisierung von Daten auf adaptiv verfeinerten Gittern. Die hier entwickelten Visualisierungsverfahren zum Volume Rendering wurden im Rahmen einer Kooperation mit dem NCSA und der PSU zur Darstellung einer Reihe von Simulationen zur Entstehung und Entwicklung der ersten Sterne des Universums verwendet und entsprechend erweitert [4, 5]. Die Ergebnisse wurden ebenfalls in der oben erwähnten Discovery-Channel-Sendung gezeigt (Abbildung 2.19). Das Rendering stellte insofern eine Herausforderung dar, als es sich um eine der am höchsten aufgelösten hierarchischen Simulationen im Bereich der numerischen Astrophysik handelte. Es galt mehrere tausend Zeitschritte mit bis zu 27 räumlichen Hierarchiestufen zu visualisieren. Dabei stellte sich die zeitliche Auflösung

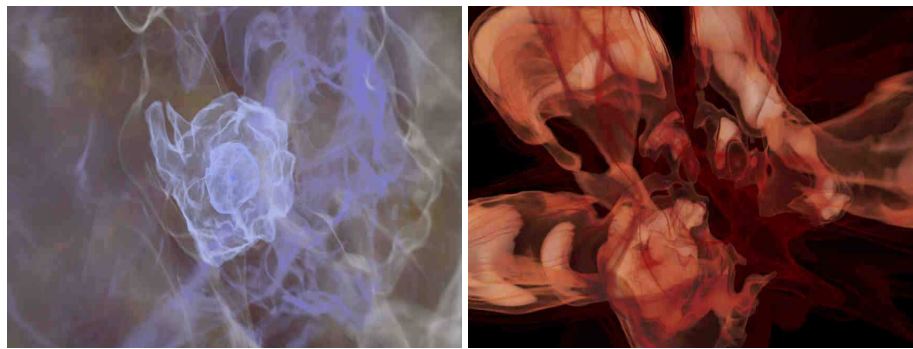


ABBILDUNG 2.19: Zwei Zeitschritte aus einer numerischen Simulation zur Entwicklung der ersten Sterne im Universum. Im linken Bild, einer adaptiv verfeinerten Simulation mit 27 Hierarchiestufen, ist die Entstehung eines Sterns durch gravitativen Kollaps einer Gaswolke tief im Inneren einer Proto-Galaxie zu sehen. Das rechte Bild zeigt die Supernova-Explosion des ca. 300 Sonnenmassen schweren Protosterns.

der während der Simulation gespeicherten Daten als zu grob für eine flüssige Animation heraus. Zwar verfahren die verwendeten numerischen Algorithmen nicht nur räumlich adaptiv, sondern lösen die höheren Hierarchiestufen auch zeitlich feiner auf, doch würde eine Speicherung aller Zeitschritte mehrere Terabyte Speicher pro Simulationslauf erfordern. Es wurde daher ein Verfahren entwickelt, das aus den gespeicherten Zeitschritten, die im allgemeinen unterschiedliche Gittertopologie aufweisen, intermediäre Gitter erzeugt und mit geeigneten Interpolationsverfahren die zugehörigen Daten aus den benachbarten Zeitschritten berechnet. So lassen sich im Nachverarbeitungsschritt Zwischenbilder erzeugen, die eine flüssige Darstellung der simulierten Vorgänge erlauben.

### **Landschaftsvisualisierung**

**Bearbeitet von:** Liviu Coconu, Hans-Christian Hege, Philip Paar

**Kooperationspartner:** Armin Werner, Wieland Röhrich (Institut für Landnutzungs-

systeme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF), Müncheberg); Oliver Deussen, Carsten Colditz (Institut für Software- und Multimediatechnik, Technische Universität Dresden); Jürgen Döllner, Konstantin Baumann und Henrik Buchholz (Hasso-Plattner-Institut für Softwaresystemtechnik, Potsdam); Jörg Rekitke (Lehrstuhl für Städtebau und Landesplanung, Fakultät für Architektur, RWTH Aachen); Adrian Herwig (freier Landschaftsarchitekt, Stechau)

**Förderung:** Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU)

Aufbauend auf geeigneten Rendering-Verfahren für komplexe, detaillierte Pflanzen- und Geländemodelle [6], wurde ein prototypischer, praktisch bereits einsetzbarer 3D-Viewer implementiert - der Lenné3D-Player. Er erlaubt, 3D-Landschaften interaktiv zu visualisieren, die mit anderen Softwarekomponenten (Karten-Editor, Pflanzenverteilungsmodul, usw.) erzeugt wurden. Diese, von den Projektpartnern in Potsdam und Dresden entwickelten Komponenten sollen künftig, zusammen mit dem 3D-Viewer, das geplante Landschaftsvisualisierungssystem *Lenné3D* bilden.

Die Level-Of-Detail-Algorithmen wurden weiter entwickelt, um noch komplexere Szenen, mit sehr vielen Objekten, insbesondere Pflanzen, in Echtzeit rendern zu können (vgl. Abbildung 2.20). Technische Grundlage sind moderne, programmierbare Grafikprozessoren (GPUs), die eine enorme Rechenleistung bieten. Um diese praktisch zu nutzen, müssen auf großen Datenmengen viele, möglichst gleichartige Operationen ausgeführt werden, die möglichst selten von Zustandsänderungen ('state transitions') unterbrochen werden. Hierzu müssen auf Anwendungsseite, d.h. in der CPU, die Teilaufgaben vorsortiert und zu ausreichend großen, die Speicherkapazität der GPU aber nicht überschreitenden Paketen zusammengefaßt werden. Kritisch ist die Verteilung der Teilaufgaben auf CPU und GPU sowie die Reihenfolge ihrer Abarbeitung. Insgesamt also ein hochkomplexes Optimierungsproblem, bei dem neben verschiedenen algorithmischen Ansätzen auch die speziellen Fähigkeiten moderner Grafikprozessoren, die Bandbreite und Latenzen bei Datentransfers zwischen CPU und GPU, die Verzögerungen durch Zustandsübergänge innerhalb der GPU und die begrenzte Speicherkapazität der GPU zu beachten sind.

Besondere Aufmerksamkeit wurde den Beleuchtungsmodellen für Pflanzen geschenkt. Die herkömmlichen Echtzeit-Beleuchtungsmodelle sind für Naturszenen im Allgemeinen nicht geeignet. Deswegen wurde hier wieder die Programmierbarkeit moderner Grafikhardware ausgenutzt, um spezielle Beleuchtungstechniken zu implementieren, die deutlich bessere Bilder liefern. Das zu verwendende Beleuchtungsmodell kann vom Benutzer, je nach Anforderungen, ausgewählt werden.

Der 3D-Viewer soll in verschiedener Hinsicht weiterentwickelt werden. Um noch wesentlich komplexerer Szenen visualisieren zu können, soll der Level-of-Detail-Ansatz nicht nur lokal (pro Pflanzenmodell), sondern global für die ganze Szene verwendet werden. In diesem Zusammenhang werden gegenwärtig verschiedenen Techniken analysiert, u.a. auch bildbasierte Verfahren. Die Beleuchtungs- und Schattenverfahren

sollen weiterhin verbessert werden und auch atmosphärischer Effekte sollen berücksichtigt werden. Eine weitere Aufgabe besteht darin, den 3D-Viewer mit den anderen Komponenten in ein System zu integrieren.



ABBILDUNG 2.20: Echtzeitdarstellung einer nachmodellierten 3D-Landschaftsszene (aus einem Gebiet in der Uckermark) im Lennè3D-Player. Die Zahl der dargestellten Pflanzentypen soll, der Realität entsprechend, künftig noch ca. verzehnfacht werden.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Wie auch in den vergangenen Jahren umfasste der Themenbereich *virtuelle Labore* eine Reihe weiterer Projekte, die kurz umrissen werden sollen.

**3D-Visualisierungssystem Amira** (Detlev Stalling, Malte Westerhoff, H.-Ch. Hege; Kooperation: Indeed - Visual Concepts GmbH, Berlin; TGS Inc., San Diego, USA)

Das Programmsystem Amira stellt die Basis für die Mehrzahl der in der Abteilung Wissenschaftliche Visualisierung des ZIB entwickelten virtuellen Labore dar. Dabei handelt es sich um ein objekt-orientiertes und modulares 3D-Visualisierungssystem, mit dem unter anderem komplexe statische und dynamische Skalar- und Vektorfelder dargestellt, 3D-Bilddaten segmentiert, sowie Oberflächen- und Volumengitter rekonstruiert werden können.

Amira ist seit 1999 in einer kommerziellen Version verfügbar, die von der Spin-Off Firma *Indeed - Visual Concepts GmbH* entwickelt wird. Die erfolgreiche Zusammenarbeit zwischen dem ZIB und Indeed wurde im Jahr 2002 weitergeführt. Die Ver-



marktung von Amira wird von der Firma TGS Inc., San Diego (CA), durchgeführt. Durch die von TGS organisierten Messeauftritte konnten verschiedene ZIB-Projekte auf wichtigen internationalen Konferenzen wie Siggraph 2002, Supercomputing 2002 oder Visualization 2002 einem breiten Publikum vorgestellt werden.

Im Oktober 2002 wurde die Version 3.0 von Amira fertiggestellt. Diese Version bietet unter anderem ein erheblich verbessertes Skript-Interface. Mit Hilfe sogenannter Skriptobjekte lassen sich Amira Module mit einem vollständigen User-Interface leicht in der Amira eigenen Tcl-basierten Skriptsprache erstellen. Außerdem wurde die komplette Kette zur Geometrierekonstruktion aus Bilddaten stark verbessert. Die Bildsegmentierung wurde durch einfache interaktive Techniken und neue Methoden zur Interpolation von Segmentierungsergebnissen zum Teil erheblich vereinfacht. Die Oberflächenrekonstruktion gestattet nunmehr die Erstellung von glatten Flächenmodellen, die jedoch weiterhin alle Details der Segmentierung enthalten. Die Tetraedergenerierung konnte deutlich robuster gemacht und die Netzqualität weiter verbessert werden.

Außerdem wurde die Entwicklung von AmiraVR fortgeführt, einer Erweiterung, die Amira in immersiven VR-Umgebungen nutzbar macht. Verschiedene Standardmodule wurden so erweitert, dass man mit ihnen in 3D interagieren kann, z.B., Verschieben von Seed-Volumina für Stromlinienberechnungen, Selektieren verschiedener Teile eines Oberflächenmodells oder Auswertung von 3D-Feldern an beliebigen Punkten. AmiraVR wurde erfolgreich auf verschiedenen Veranstaltungen demonstriert, so zum Beispiel im SGI Reality Center auf der Siggraph 2002, oder in einer halbrunden von sechs Laser-Projektoren ausgeleuchteten Kuppel bei der Firma Zeiss in Jena (siehe Abbildung 2.21).

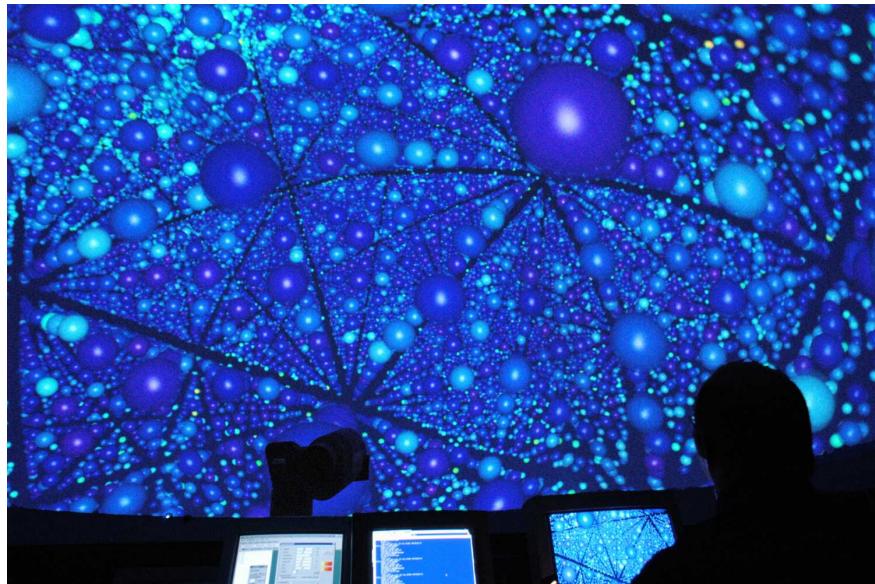


ABBILDUNG 2.21: AmiraVR-Präsentation in einer Kuppel der Firma Carl-Zeiss Jena.

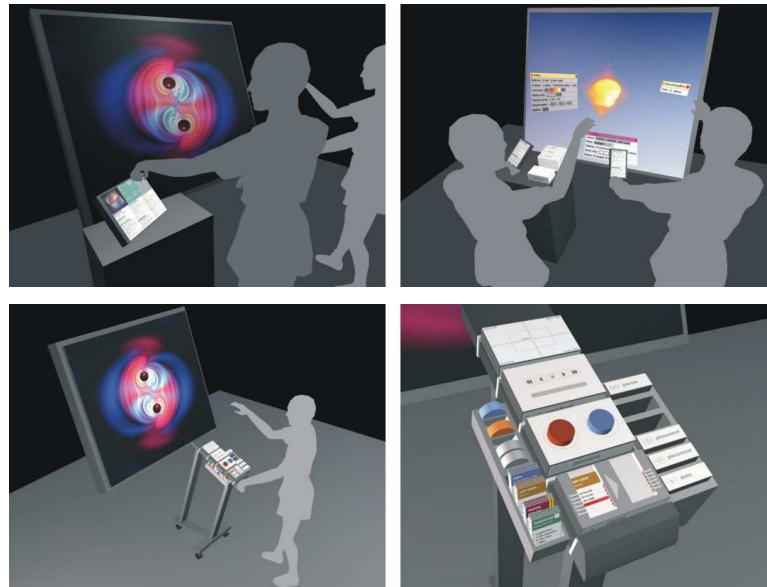


ABBILDUNG 2.22: Oben: Kombination einer AmiraVR-Projektion mit einem Display-Tablett und PDAs. Unten: Tangible Interface zur Steuerung einer AmiraVR-Visualisierungsumgebung.

**Mehrfach-Display und Tangible-Interface-Erweiterungen für AmiraVR** (Brygg Ullmer, Andrei Hutano, Werner Benger; Kooperation: AG Ed Seidel, Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm )

Der Einsatz der AmiraVR-Visualisierungssoftware auf großformatigen Stereo-Projektionsleinwänden stellt verschiedene neue Herausforderungen an die 3D-Visualisierung, insbesondere auch bei halbimmersiven Stereoumgebungen und bei der Einbindung mehrerer Benutzer gleichzeitig. Vor allem das Design der Benutzerschnittstelle zur Steuerung und Konfiguration der virtuellen Umgebung ist betroffen. In unserer Arbeitsgruppe werden neue Ansätze für Mehrfach-Displays und sogenannte ‘tangible Interfaces’ [7] verfolgt, um AmiraVR einfacher und effektiver benutzen zu können (siehe Abbildung 2.22).

Der erste Ansatz verfolgt alternative Anzeigemöglichkeiten auf 2D-Display-Tabletts und PDAs (Abbildung 2.22, oben), um Menüs, Parameterfenster und andere Elemente der Benutzerschnittstelle außerhalb der 3D-Projektionsumgebung darzustellen. Wird beispielsweise ein Visualisierungsparameter mit Hilfe solcher Eingabegeräte verändert, erscheint das zugehörige grafische Parameterinterface als animierte 3D-Grafik auf der gemeinsam sichtbaren Projektionsleinwand. Ein anderes Konzept basiert auf der Verwendung physischer Objekte als ‘tangible Interfaces’, um die Parameter der Visualisierungsumgebung sowohl zu veranschaulichen als auch besser steuern zu können. Die physischen Objekte sind sowohl Platzhalter als auch Steuerobjekte für

Eingabeparameter, Datensätze, Rechnerressourcen oder andere virtuelle Objekte (Abbildung 2.22, unten). Die Vorteile dieses Ansatzes sind: vereinfachte Interaktion der Benutzer mit der virtuellen Umgebung, bessere Handhabung der diversen Eingabeparameter, einfache Verweise und Authentifizierungen für Ressourcen im Grid, sowie leichtere Übertragbarkeit zwischen Desktopanwendungen und Projektionsumgebungen.

Diese Ansätze werden im Zusammenhang mit den Arbeiten des GridLab-Projektes an Visualisierungen und Mobile Devices entwickelt. Wir arbeiten eng mit Astrophysikern des AEI zusammen, um den Einsatz dieser Techniken in deren täglichen Forschungsumfeld zu ermöglichen und das Feedback von Endanwendern in die aktuelle Entwicklung einfließen zu lassen.

**Virtuelles Neurolabor** (Malte Westerhoff (geb. Zöckler), Alexander Maye, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard; Kooperation: Randolf Menzel und Robert Brandt (AG Neurobiologie, Institut für Tierphysiologie, FU Berlin), Martin Heisenberg und Michael Mader (AG Genetik, Biozentrum, Universität Würzburg), Klaus Obermayer und Michael Scholz (Fachgebiet Neuronale Informationsverarbeitung, Institut für Kommunikations- und Softwaretechnik, TU Berlin), Eckart Gundelfinger und Rainer Pilot (Abt. Neurochemie und Molekulare Biologie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg), Werner Zuschratter (Speziallabor Elektronen- und Konfokalmikroskopie, Institut für Neurobiologie, Magdeburg), Karl-Friedrich Fischbach (Institut für Biologie III, Universität Freiburg/Br.), Robin Hiesinger (Baylor Medical College, Houston), Indeed - Visual Concepts GmbH ; Förderung: BMBF, Projektverbund "Virtuelles Gehirn: Visualisierung von 3D-Strukturen und Funktionen")

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

Mit Hilfe der bisher entwickelten Verfahren zur Bilddatenverarbeitung, Segmentierung und Geometrie-Rekonstruktion, lassen sich inzwischen anatomisch genaue Modelle einzelner Strukturen in Insektengehirnen erzeugen [8]. Diese dienen einerseits dazu, funktionelle Daten mit anatomischen Strukturen zu korrelieren, andererseits sind sie Grundlage für mathematische Modelle zur Simulation der Signalausbreitung im Gehirn (siehe Abbildung 2.23).

**Vektorfeldvisualisierung** (Tino Weinkauff, Hans-Christian Hege; Kooperation: B. Noack, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin)

Im Rahmen dieser Aktivität entsteht ein virtuelles Labor zur Visualisierung von Vektorfeldern, welches die in AMIRA vorhandenen Methoden erweitern und ergänzen soll. Dies beinhaltet insbesondere Methoden zur topologischen Analyse von Strömungsfeldern [9] und Verfahren zur Visualisierung von zeitabhängigen Vektorfeldern.

Im Jahr 2002 wurde die Kooperation mit dem Hermann-Föttinger-Institut für Strö-

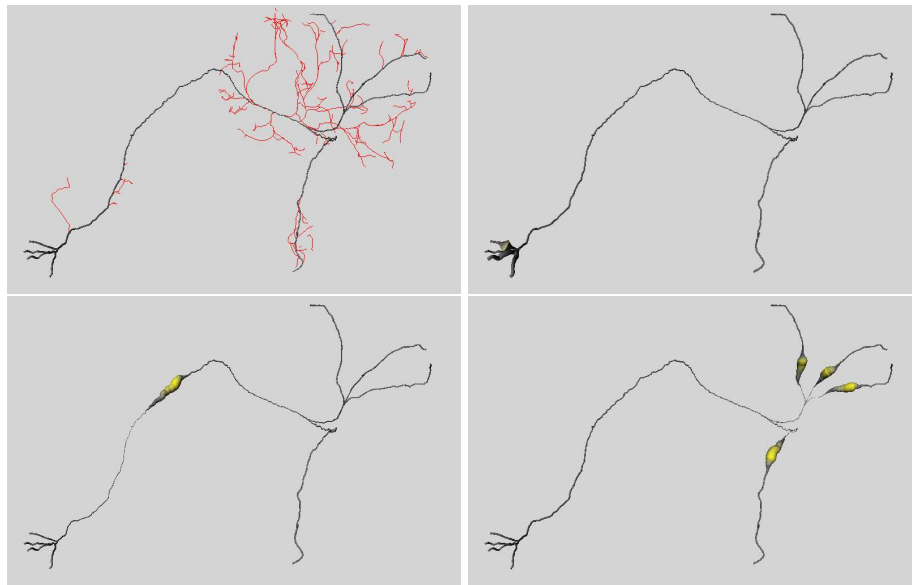


ABBILDUNG 2.23: Modellrechnung (Nowak, Deuffhard) der Signalausbreitung in einem Projektionsneuron der Honigbiene. Die Geometrie ist ein Teilbaum (erstes Bild, fett dargestellt) eines real aufgenommenen Neurons. Die Abbildungen zeigen einzelne Zeitschritte. Nach Stimulation mehrerer Synapsen im dendritischen Bereich, kann die Signalausbreitung im Axon beobachtet werden, das mit dem Hodgkin-Huxley-Modell beschrieben wird. Die Liniendicke und Farbe (nur in der elektronischen Version des Berichts) kodiert das elektrische Potential.

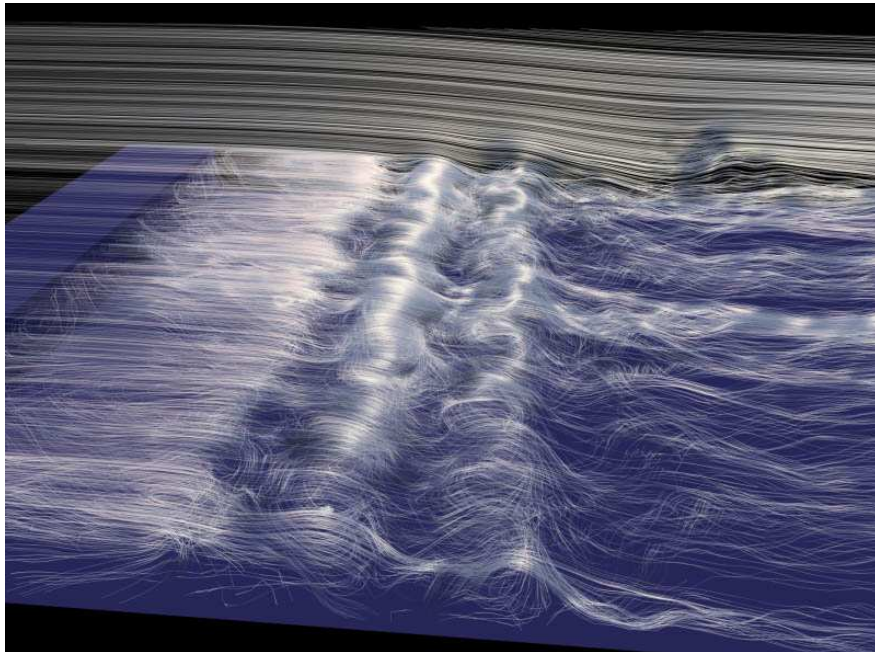


ABBILDUNG 2.24: Visualisierung der Strömung an einer rückwärtsgewandten Stufe mittels beleuchteter Stromlinien, deren Verteilung durch Krümmungsgrößen des Vektorfeldes gesteuert wurde. Der laminare Anteil der Strömung wurde nur im hinteren Teil in einer schmalen Schicht dargestellt.

mungsmechanik (HFI) erfolgreich fortgeführt. Neben dem Austausch von interessanten Vektorfelddaten und deren Visualisierung wird auch gemeinsam an neuen Methoden zur Analyse und Darstellung von Vektorfeldern gearbeitet. Dies führte u.a. zu einer Verteilungstechnik für Stromlinien, die durch Krümmungsgrößen des Vektorfeldes beeinflusst wird [10]. Hierbei werden die Startpunkte der Stromlinien bevorzugt in Gebiete hoher Krümmungswerte gestreut. Auf diese Weise werden turbulente Regionen hervorgehoben und Stromlinien ausgeblendet, die durch nahezu laminare Anteile der Strömung verlaufen. Abbildung 2.24 zeigt ein auf diese Weise visualisiertes Vektorfeld. Diese Visualisierung wurde im November 2002 beim jährlich stattfindenden Wettbewerb ‘Gallery of Fluid Motion’ der American Physical Society ausgezeichnet.

### **Virtuelle Labore im Grid**

Das Forschungsgebiet “Grid-Computing” beschäftigt sich mit der Bereitstellung von kohärenten und integrierten Schnittstellen zu im Netz verteilten Ressourcen. Für die Virtuellen Labore ist dabei sowohl der Zugriff auf entfernte Datenquellen und Displaysysteme, als auch die Verteilung der gesamten Visualisierungspipeline (siehe Abbildung 2.25) interessant. Darauf aufbauend werden auch Softwaresysteme realisiert, die netzverteiltes, kooperatives Arbeiten ermöglichen.

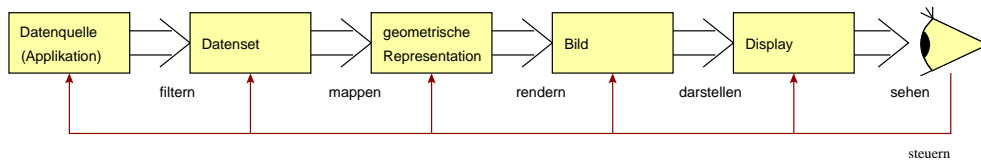


ABBILDUNG 2.25: Das dargestellte Schema einer Visualisierungspipeline ist die Grundlage aller Visualisierungssysteme. Die Blöcke dieser Pipeline können prinzipiell beliebig im Netz verteilt werden, stellen dabei jedoch verschiedenste (i.A. sehr hohe) Anforderungen an die damit verbundene Kommunikation.

**Anwendung der Tele-Immersion in Weitverkehrsnetzen** (Tino Weinkauf, André Merzky, Harald Knipp, Hans-Christian Hege; Kooperation: Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN)/Lehrgebiet Rechnernetze und Verteilte Systeme (RVS), Universität Hannover; Förderung: BMBF/DFN)

In dem gemeinschaftlich mit dem RRZN Hannover durchgeführten Projekt [13] besteht die Hauptaufgabe des ZIB in der Entwicklung einer Bibliothek (PaDEV) zur parallelen Extraktion von Daten aus einer laufenden Computersimulation. Diese Bibliothek wurde, wie in Abbildung 2.26 gezeigt, implementiert. Im Jahr 2002 wurden insbesondere neue Visualisierungstechniken und Ausgabemethoden hinzugefügt. Durch spezielle Anpassungen der Visualisierungsalgorithmen an die Struktur der Bibliothek konnten besonders gute Laufzeiten erreicht werden.

Die Ergebnisse dieses nunmehr auslaufenden Projektes finden auch im GriKSL-Projekt Verwendung (siehe nachfolgenden Abschnitt).

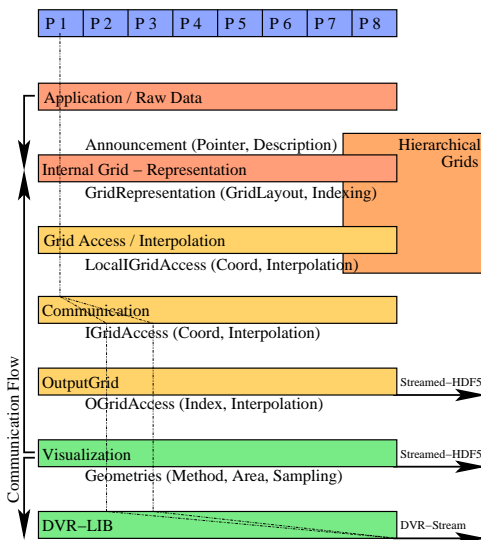


ABBILDUNG 2.26: Aufbau der "Parallel Data Extraction and Visualization Library" (PaDEV): Eine parallele Datenextraktionsschicht stellt dem ebenfalls verteilten Visualisierungsalgorithmus Anwendungsdaten zur Verfügung. Die Ausgabe der dort erzeugten Geometrien erfolgt über verschiedene Streaming-Verfahren.

**GriKSL — Grid-basierte Simulation und Visualisierung** (André Merzky, Ralf Kähler, Werner Benger, Hans-Christian Hege; Kooperation: AG Ed Seidel, Max-

Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm;  
Förderung: BMBF/DFN)

Das Projekt GriKSL beschäftigt sich mit der Entwicklung und Integration von Grid-Technologien in realen Anwenderszenarien. Diese Szenarien basieren in diesem Falle auf der numerischen astrophysikalischen Simulationsumgebung Cactus und dem Visualisierungssystem Amira. Der Fokus liegt auf der Handhabung sehr großer, zum Teil hierarchisch aufgebauter, netzverteilter Datensätze [11].

In den ersten beiden Projektquartalen wurden von Seiten des ZIB verschiedene Amira-Visualisierungsmodule zur Darstellung von Daten auf hierarchischen Gittern an die besonderen Anforderungen des Renderns von Daten auf entfernter Rechnern angepasst [12], siehe Abbildung 2.27.

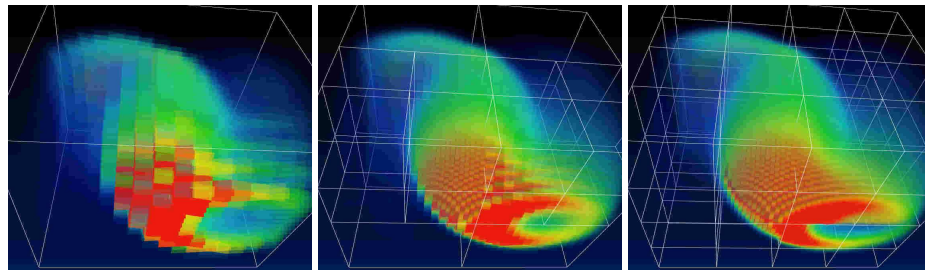


ABBILDUNG 2.27: Progressives Rendern eines entfernt gespeicherten großen Datensatzes: Zunächst wird eine grobe Auflösungsstufe der Daten auf dem entfernten Rechner generiert und auf den lokalen Visualisierungrechner übertragen, dann werden sukzessive näher am Blickpunkt des Betrachters liegende Bereiche des Datensatzes in immer höherer Auflösung angefordert und dargestellt. So können auch sehr große Datensätze unter optimaler Nutzung der vorhandenen Netzbandbreite und lokalen Grafikleistung schnell visualisiert werden.

Weiterhin wurden die im Vorgängerprojekt TIKSL entwickelten Lösungen zum Zugriff auf entfernte Datensätze erweitert und basieren nunmehr auf dem GridFTP-Protokoll. In Zusammenarbeit mit dem GridLab-Projekt werden diese Entwicklungen gegenwärtig optimiert und in die Anwendungsumgebungen integriert.

Der dritte Teilbereich des Projekts umfasst Arbeiten zur Nutzung ‘beliebiger’ Datenmodelle innerhalb der Visualisierungsumgebung. Während in der Anwender- und Projektgruppe das Datenformat mit HDF5 fest vorgegeben ist, bestehen bei der Definition der genutzten Datenmodelle viele Freiheiten. Dies erschwert die Nutzung der geschaffenen Lösung für andere Projekte und Anwendergruppen. Das Problem wird zum einen durch ein allgemeines Datenmodell basierend auf dem mathematischen Konzept von Faserbündeln angegangen [14], zum anderen durch einen Plugin-Mechanismus in den I/O-Schichten von Amira, der die Verwendung von beliebigen Datenmodellen für HDF5 ohne Änderungen an den Visualisierungsmodulen ermöglicht.

**GridLab — A Grid Application Toolkit and Testbed for a Grid Laboratory** (Andrei Hutanu, Brygg Ullmer, André Merzky; Förderung: Europäische Union)

Im Projekt GridLab werden anwendungsorientiert Grid-basierte Middleware und Services entwickelt. Als eine der 14 am Projekt beteiligten Einrichtungen arbeitet die Abteilung “Wissenschaftliche Visualisierung” zusammen mit der Abteilung “Computer Science” des ZIB an der Entwicklung von Grid-fähigen Daten-Management- und Visualisierungstechniken sowie Diensten [15, 16, 17].

Unsere Arbeiten umfassten einen File-Movement-Service, den Prototypen eines Streaming-Servers, einen Browsing-Service für entfernte Filesysteme, und die Integration des Remote-Browsers in die Visualisierungsumgebung Amira. Die Funktionalität des File-Movement-Services basiert auf der Globus-GASS-Bibliothek und deren Copy-Fähigkeiten. Der Service nutzt ein SOAP-Protokoll zur Kommunikation und Grid-Security-Mechanismen (GSI) zur Authentifizierung und zur Delegation von Nutzerrechten. Er bietet 3rd-Party-File-Transfer und nutzt parallele Datenströme zur Durchsatzoptimierung. Auf der Basis eines experimentellen GridFTP-Servers der Globus-Gruppe mit serverseitigen Datenfiltern wurde außerdem ein Streaming-Server implementiert. Dieser unterstützt schnelle, zuverlässige und gesicherte Datenströme und kann mehrere Datenströme von einer Quelle zu verschiedenen Konsumenten unterhalten (dies allerdings ohne Unterstützung für Multicast- oder Echtzeitanwendungen).

Weiterhin wurde ein Browser-Service für entfernte Filesysteme implementiert, welcher Verzeichnis-Listings für URLs mittels GSIFTP und FTP bereitstellt. Diese Funktionalität wurde in die Visualisierungsumgebung Amira integriert. Weitere Arbeiten zielen auf die Verbesserung des Zugriffs von Amira auf Netzwerkressourcen und auf die Implementierung von sicheren Mechanismen zur Steuerung und Kontrolle von Amira-basierten Visualisierungsdiensten ab. Diese Fähigkeiten sollen über neue Nutzerschnittstellen in die AmiraVR-Visualisierungsumgebung einfließen.

**CoDiSP – Collaborative Distributed Surgery Planning** (Thilo Böhm, Stefan Zachow, André Merzky, Brygg Ullmer, Hans-Christian Hege; Kooperation: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader (Kantonspital Basel, Klinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Schweiz, Center of Advanced Cranio-Maxillofacial Surgery am Klinikum rechts der Isar, Technische Universität München); Förderung: BMBF/DFN)

Ziel ist es, die im Projekt “Computergestützte 3D-Operationsplanung für die Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie” entwickelte Software verteilt nutzbar zu machen, so daß chirurgische Planungsaufgaben, wie in Abschnitt 2.2.4 beschrieben, kooperativ über das Netz durchführbar werden [18].

Während der Planung erfolgen verschiedene Formen des Datenaustausches zwischen den beteiligten Seiten. Der schnelle und zuverlässige Transfer großvolumiger Daten steht dabei im Vordergrund. Gleichzeitig sind Sicherheitsanforderungen, wie Authentifizierung der Teilnehmer und sicherer Datentransfer, zu gewährleisten. Dies wird durch die Nutzung der Dienste des Globus Toolkit erreicht.





ABBILDUNG 2.28: Verteilte Operationsplanung (Telekonferenz) und Patientenaufklärung

Diese Komponenten wurden in ein Schichtenmodell integriert, das die Kommunikationsgrundlage aller an einer kooperativen Sitzung beteiligten Komponenten bildet. Anwendungen haben über die *Web-Service-API*-Schicht Zugriff auf die Mechanismen zur Gruppenkommunikation. Über einfache Funktionsaufrufe werden in der darunter liegenden *SOAP*-Schicht XML-Nachrichten erzeugt, die die zu übermittelnden Daten enthalten. Diese Daten werden an den Security-Layer übergeben, der Sicherheitsmechanismen (Authentifizierung und Verschlüsselung) realisiert und auf entsprechenden Transportprotokollen aufsetzt. Zugriff auf den Security-Layer erhält man durch eine *Interface-API*-Schicht, die eine Schnittstelle zu den eigentlichen Security Providern bildet (*GlobusGSI* oder *Open SSL*). Der *TLI Wrapper* stellt die Schnittstelle zu den Transportprotokollen zur Verfügung. Während großvolumige Dateien mittels GridFTP transportiert werden, können XML-Nachrichten via TCP übermittelt werden.

Die softwaretechnischen Vorbereitungen zur Verteilung des Planungssystems konnten in exemplarischen Szenarien erfolgreich getestet werden [19]. Der gegenwärtige Projektstand erlaubt, das verteilte Planungssystem (noch ohne integrierte Telefonkonferenz) in einer Testumgebung zu starten und zu initialisieren (siehe Abbildung 2.28).

### Publikationen

- [1] H.-C. Hege, M. Seebaß, D. Stalling, M. Zöckler, *A Generalized Marching Cubes Algorithm Based on Non-Binary Classifications*, ZIB Preprint SC-97-05, 1997.
- [2] F. Cordes, M. Weber und J. Schmidt-Ehrenberg *Metastable Conformations via Successive Perron-Cluster Cluster Analysis of Dihedrals*, Report 02-40, ZIB, 2002.

- 
- [3] J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum, H.-C. Hege, *Visualizing Dynamic Molecular Conformations*, Proceedings of IEEE Visualization 2002, pp. 235-242.
- [4] R. Kähler, H.-C. Hege: *Texture-based volume rendering of adaptive mesh refinement data*. The Visual Computer, 18, pp. 481–492, 2002.
- [5] R. Kähler, D. Cox, R. Patterson, S. Levy, H.-C. Hege, T. Abel: *Rendering the First Star in the Universe - A Case Study*. Proceedings of IEEE Visualization 2002, pp. 537-540.
- [6] L. Coconu, H.-C. Hege: *Hardware-Accelerated Point-Based Rendering of Complex Scenes*. Proc. 13th Eurographics Workshop on Rendering Techniques 2002, pp. 43-52.
- [7] B. Ullmer: *Tangible Interfaces for Manipulating Aggregates of Digital Information*, Doctoral dissertation, MIT Media Lab, Aug. 2002.
- [8] M. Westerhoff, A. Maye, R. Brandt and R. Menzel, *3D Geometry Reconstruction in Neuroanatomy* Int. Neuroscience Summit, Berlin, 28.Nov.-1.Dez., www.ins2002.org, Abstract Book, p. 49.
- [9] T. Weinkauff, H. Theisel: *Vector Field Metrics Based on Distance Measures of First Order Critical Points*. Proc. of 10-th Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2002 (WSCG), Short Communication Papers, pp. 121–128, 2002.
- [10] T. Weinkauff, H. Theisel: *Curvature Measures of 3D Vector Fields and their Applications*. Proc. of 10-th Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2002 (WSCG), pp. 507–514, 2002.
- [11] H.-C. Hege, A. Merzky: *GriKSL – Immersive Überwachung und Steuerung von Simulationen auf entfernten Supercomputern*. DFN-Mitteilungen, Heft 59, Sept. 2002, pp. 5–7.
- [12] H.-C. Hege, R. Kähler, E. Seidel, T. Radke: *GriKSL zeigt Live-Demos auf der iGrid2002*. DFN-Mitteilungen, Heft 60, Nov. 2002, pp. 21–22.
- [13] S. Olbrich, T. Weinkauff, A. Merzky, H. Knipp, H.-C. Hege, H. Pralle: *Lösungsansätze zur Visualisierung im High Performance Computing und Networking Kontext*. In: J. v. Knop, W. Haverkamp Hrsg.), *Zukunft der Netze – Die Verletzbarkeit meistern*, GI-Edition, Lecture Notes in Informatics, Volume P-17, pp. 269–279, 2002.
- [14] W. Benger, *Tensor Field Visualization via a Fiber Bundle Data Model*, Ph.D. Thesis, in preparation.

- [15] G. Allen, A. Merzky, J. Nabrzyski, E. Seidel: *GridLab - A Grid Application Toolkit and Testbed*, angenommen bei: Future Generation Computing Systems, Special Issue on Grid Computing.
- [16] G. Allen, D. Angulo, T. Goodale, A. Merzky, J. Nabrzyski, J. Pukacki, M. Russel, T. Radke, E. Seidel, J. Shalf, O. Wahrens: *GridLab Architecture*, eingereicht bei 11th IEEE Int. Symp. on High Performance Distributed Computing (HPDC-11), Edinburgh, 2002.
- [17] G. Allen, D. Angulo, T. Goodale, T. Kielmann, A. Merzky, J. Nabrzyski, J. Pukacki, M. Russell, T. Radke, E. Seidel, J. Shalf, I. Taylor. *GridLab: Enabling Applications on the Grid: A Progress Report*, 3rd Int. Workshop on Grid Computing, Supercomputing 2002, Lecture Notes in Computer Science (LNCS), vol. 2536, pp. 39–45.
- [18] H.-F. Zeilhofer, H.-C. Hege: *Operieren im Medizin-Grid*. DFN-Mitteilungen, Heft 60, Nov. 2002, pp. 19–20.
- [19] T. Böhm: *Web Service Based Data Management for Grid Applications*. In: Matthews, B. et al. (eds.) *Euroweb 2002 - The Web and the GRID: from e-science to e-business*, Oxford, UK, pp. 126–135, 2002.

### 2.2.7 Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung

Nichtlineare Ansätze verfolgen wir zur Optimierung mehrstufiger stochastischer Modelle sowie zur Steuerung komplexer Systeme mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Dem ersten Gebiet ist das Projekt zur Portfoliooptimierung zuzuordnen. Bei der Komplementaritätsmethode für Optimalsteuerungsprobleme und im Projekt zur Steuerung der Lastverteilung in Gasnetzen ist die adäquate Behandlung der Differentialgleichungen wesentlich.

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 stochastischen Optimierung und der Optimierung in Gasnetzen erreichen wir dies durch rekursive Algorithmen, bei der Komplementaritätsmethode durch einen inexakten Newton-Pfadverfolgungsalgorithmus mit adaptiver Mehrgitter-Methode in der innersten Schleife.

#### **Affinvariante Newtonmethoden für Randwertprobleme bei Differentialgleichungen**

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard

Im Berichtszeitraum wurde die schon seit langem geplante Forschungsmonographie “Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algo-

rithms” [1] schließlich nahezu zum Abschluß gebracht. Sie soll 2003 erscheinen. Für den hier in Rede stehenden Schwerpunkt finden sich neue Resultate im wesentlichen in Kapitel 7 und 8 des Buches, weshalb im folgenden ein Auszug aus der “Outline” dieser beiden Kapitel gegeben wird.

“**Chapter 7.** In this chapter, we consider nonlinear two-point boundary value problems for ODEs. The presentation and notation is closely related to Chapter 8 in the textbook ‘Scientific Computing with Ordinary Differential Equations’ by P. Deuffhard and F. Bornemann. Algorithms for the solution of such problems can be grouped into two approaches: *initial value* methods such as multiple shooting and *global discretization* methods such as collocation. Historically, affine covariant Newton methods have first been applied to this problem class — with significant success.

In Section 7.1, the realization of Newton and discrete continuation methods within the standard multiple shooting approach is elaborated. Gauss-Newton methods for parameter identification in ODEs are discussed in Section 7.2, also based on multiple shooting. For periodic orbit computation, Section 7.3 presents Gauss-Newton methods, both in the shooting approach and in a Fourier-collocation approach; the latter approach is usually called Urabe method or also harmonic balance method.

In Section 7.4, we concentrate on *polynomial* collocation methods, which have reached a rather mature status including affine covariant Newton methods. In Section 7.4.1, the possible discrepancy between discrete and continuous solutions is studied including the possible occurrence of so-called ‘ghost solutions’ in the nonlinear case. On this basis, the realization of *quasilinearization* seems to be preferable in combination with collocation. The following Section 7.4.2 is then devoted to the key issue that quasilinearization can be interpreted as an *inexact Newton method in function space*: the approximation errors in the infinite dimensional setting just replace the inner iteration errors arising in the finite dimensional setting. With this insight, an adaptive multilevel control of the collocation errors can be realized to yield an adaptive inexact Newton method in function space — which is the bridge to adaptive Newton multilevel methods for PDEs (compare Section 8.3 below).

**Chapter 8.** This chapter deals with Newton methods for boundary value problems (BVPs) in nonlinear partial differential equations (PDEs). There are two principal approaches: (a) finite dimensional Newton methods applied to a given system of already discretized PDEs, also called *discrete Newton methods*, and (b) function space oriented Newton methods applied to the continuous PDEs, at best in the form of *adaptive Newton multilevel methods*.

Before we discuss the two principal approaches in detail, we present an affine covariant analysis of *asymptotic mesh independence* that connects the finite dimensional and the infinite dimensional Newton methods, see Section 8.1. In Section 8.2, we assume the standard situation in industrial technology software, where the grid generation module is strictly separated from the solution module. Consequently, nonlinear PDEs arise there as discrete systems of nonlinear equations with fixed finite, but usually high

dimension  $n$  and large sparse ill-conditioned Jacobian  $(n, n)$ -matrix. This is the domain of applicability of finite dimensional inexact Newton methods. More advanced, but often less favored in the huge industrial software environments, are *function space* oriented inexact Newton methods, which additionally include the adaptive manipulation of discretization meshes within a multilevel or multigrid solution process. This situation is treated in Section 8.3 and compared there with *finite dimensional* inexact Newton techniques. ”

Neu ist hier insbesondere der Konvergenzsatz für Kollokationsmethoden unter Einschluss der möglichen Existenz von ‘Geisterlösungen’ sowie die vereinfachte Herleitung des asymptotischen Gitterunabhängigkeitsprinzips.

### **Komplementaritätsmethoden für Probleme der optimalen Steuerung**

**Bearbeitet von:** Martin Weiser, Peter Deuffhard, Anton Schiela

**Kooperationspartner:** Fredi Tröltzsch (TU Berlin)

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft, Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, Teilprojekt A1

Das in den letzten Jahren zur Lösung von Optimalsteuerungsproblemen entwickelte Verfahren zeichnet sich durch die simultane Behandlung der Nebenbedingungen und der Diskretisierung der Differentialgleichungen aus. Dabei entfallen die für indirekte Verfahren notwendigen analytischen Vorarbeiten, während gleichzeitig der Strukturverlust durch vorzeitige Diskretisierung bei direkten Verfahren vermieden wird.

Während zuvor die prinzipielle Machbarkeit sowohl von theoretischer als auch algorithmischer Seite nachgewiesen wurde, konzentrierte sich die Arbeit 2002 auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahrens. So konnte für eine vereinfachte Problemklasse die lineare Konvergenz des Verfahrens gezeigt werden. Dabei ist die Konvergenzrate unabhängig von der Feinheit der Diskretisierung, was eine qualitative Verbesserung gegenüber der Anwendung endlichdimensionaler Resultate auf das diskretisierte Problem darstellt. Auf numerischer Seite wurde die bestehende Implementierung etwa um den Faktor 2 beschleunigt und um algorithmische Optionen zur Diskretisierung und Lösung der linearen Systeme erweitert.

In der zweiten Hälfte des Jahres konnte die Arbeit am Projekt A1 des Forschungszentrums aufgenommen werden, so daß sich der Schwerpunkt zunehmend zur Erweiterung auf partielle Differentialgleichungen verlagert. Das bestehende Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen wird gemeinsam mit der Abteilung Wissenschaftliche Software weiterentwickelt.

### **Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen**

**Bearbeitet von:** Klaus Ehrhardt, Marc Steinbach

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

**Förderung:** BMBF-Förderschwerpunkt “Neue Mathematische Verfahren in Industrie

und Dienstleistungen”

Ziel des Projektes ist die optimale operative Planung der Lastverteilung in Erdgas-Leitungsnetzen 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. Mathematisch führt dies auf hochdimensionale gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme mit nichtlinearen hyperbolischen Differentialgleichungen in den Rohrleitungen.

Im Vorhaben werden gemeinsam mit den industriellen Verbundpartnern Ruhrgas AG und PSI AG die nichtlinearen Modellkomponenten sowie geeignete Vereinfachungen untersucht und es werden für den Fall fixierter Schaltvariablen strukturangepaßte Optimierungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Letztere sollen später als Teilproblem-Löser in nichtlinearen Branch-and-Bound-Verfahren zum Einsatz kommen, so daß einerseits das Gesamtproblem numerisch lösbar ist und andererseits die relevanten Nichtlinearitäten und kombinatorischen Aspekte soweit möglich direkt erfaßt sind.

Die Zielfunktion des nichtlinearen Problems modelliert die summaren Energiekosten für den Betrieb aller Verdichterstationen sowie Bewertungen der Liefer- und Abnahmeverträge. Nebenbedingungen sind technische und vertragliche Restriktionen, insbesondere an den Ein- und Ausspeisestellen, sowie globale oder regionale Erhaltungsbedingungen. Hinzu kommen die – geeignet diskretisierten – Euler-Gleichungen der instationären Gasdynamik für ein reales Gas mit hydraulischem Druckverlust durch Reibung. Das resultierende hochdimensionale nichtlineare Optimierungsproblem liefert optimale zeitliche Steuerungsprofile für die Verdichterstationen und Regelventile. Es kann auch eingesetzt werden zur Bewertung von Entscheidungsvarianten in Havarie- oder Wartungsszenarien.

Im Berichtsjahr wurde das nichtlineare Optimierungsmodell implementiert und mit dem SQP-Code SNOPT (Gill et al.) gekoppelt. Für typische dynamische Szenarien im gegebenen Testnetz (periodische Fahrweise, Verdichterausfall) wurden optimale Steuerungsstrategien berechnet und analysiert. Die derzeitigen Arbeiten konzentrieren sich auf die Spezialisierung des SQP-Ansatzes (Sequential Quadratic Programming) hinsichtlich der zeitlichen und räumlichen Struktur (Netztopologie), um in Zukunft auch große Netze routinemäßig optimieren zu können.

### **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 Nicht-linearitäten wird hier die vertikale und horizontale Kopplung der Knoten explizit berücksichtigt [3, 4, 6].

Mit den in diesen Arbeiten sowie in [2, 5] gewonnenen theoretischen Erkenntnissen und praktischen Erfahrungen konnte im Berichtsjahr die Implementierung eines Softwaretools zur automatischen Erzeugung der problemspezifischen linearen Algebra abgeschlossen werden. Entsprechend der spezifischen Besetzungsstruktur erzeugt dieser Codegenerator Datenstrukturen und Knotenoperationen als Quellcode in C++. Dies garantiert – ohne aufwendige manuelle Anpassungen – einen sehr geringen Speicherplatzbedarf bei der Lösung der (oft extrem großen) Szenariobaummodelle. Für ein finanzmathematisches Modell wird auch bereits die Laufzeiteffizienz des bestehenden handoptimierten 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 stochastischen Optimierungsprobleme* theoretisch analysiert sowie hocheffiziente Lösungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Dies wird in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Unternehmensforschung (IfU) der Universität St. Gallen durchgeführt, mit dem eine formelle Kooperation besteht.

Besondere Schwierigkeiten entstehen einerseits durch die Größe der Optimierungsprobleme, andererseits durch die Tatsache, daß die Lösungen *hochgradig degeneriert* sind [5]. Die algorithmische Behandlung basiert auf der Ausnutzung problemspezifischer Sparse-Strukturen und auf den inhärenten Regularisierungseigenschaften von

Innere-Punkt-Methoden [3, 4, 6]. 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.

In 2002 wurden der Modellgenerator (IfU) und das Optimierungsmodul (ZIB) mit einer neu entwickelten graphischen Benutzeroberfläche gekoppelt. Dieses erlaubt eine einfache Spezifikation der im Modell abgebildeten Finanzmarkt- und Unternehmensdaten sowie eine unmittelbare graphische Analyse der Optimierungsergebnisse. Das Softwarepaket wird unter der Produktbezeichnung DEVA von der Business Media AG (St. Gallen, Schweiz) vertrieben.

### Publikationen

- [1] P. Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algorithms*, Springer, 2003 (eingereicht Mai 2003)
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] ———, *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.
- [5] ———, *Markowitz Revisited: Mean-Variance Models in Financial Portfolio Analysis*, SIAM Review **43** (2001), Nr. 1, 31–85.
- [6] ———, *Tree-Sparse Convex Programs*, Math. Meth. Oper. Res. **56** (2002), Nr. 3, 347–376
- [7] M. Weiser, *Linear convergence of an interior point method for linear control constrained optimal control problems*, Report 02-13, ZIB, 2002.

### 2.2.8 Diskrete Strukturen

Bei der mathematischen Untersuchung von Algorithmen erweist sich die Kenntnis möglichst vieler Eigenschaften der zugrundeliegenden diskreten Strukturen als äußerst hilfreich. 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 der Graphentheorie, der Ganzzahligen Programmierung und der 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 schon an sich 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 zur 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 Untersuchung traditioneller Klassifikations- und Extremalprobleme mit Computerprogrammen.

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

*Diskrete Mathematik für die Schule* zugänglich zu machen, könnte dem Mathematikunterricht neue Impulse geben, die er dringend braucht. Graphentheorie und Kombinatorische Optimierung bieten eine inhaltliche Vielfalt und einen starken Anwendungsbezug im Zusammenhang mit interessanten und verständlichen mathematischen Verfahren. Diese Themen tragen außerdem ein großes methodisches Potential in sich, das helfen kann, moderne Mathematik Schülerinnen und Schüler zu vermitteln.

### **Stabile Mengen und perfekte Graphen**

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Annegret Wagler

**Kooperationspartner:** Stefan Hougardy (HU Berlin); Gianpaolo Oriolo (Universität Tor Vergata, Rom, Italien); Arnaud Pêcher (Laboratoire Bordelais de Recherche Informatique, Talence, Frankreich)

**Förderung:** DFG-Forschergruppe “Algorithmen, Struktur, Zufall”

Stabile Mengen in Graphen bilden eines der wichtigen Modelle in der ganzzahligen Optimierung mit Anwendungen z. B. bei der ÖPNV-Dienstplanung (siehe Projekt

*Dienstplanung*) und gewissen Fahrzeugeinsatzplanungen [4].

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 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.

Ziel ist, durch strukturelle Untersuchungen von Stabile-Mengen-Polytopen nicht perfekter Graphen die polynomiale Lösbarkeit des Stabile-Mengen-Problems für weitere Graphenklassen zu beweisen.

Wir verfolgen das Konzept *kritischer Kanten* in perfekten Graphen, deren Entfernen zum Verlust der Perfektheit führt [32, 33, 34]. Ein Graph ist *kritisch perfekt*, wenn das Entfernen einer beliebigen Kante einen imperfekten Graphen erzeugt. Mittels Konstruktionen aus [32, 33] für Graphen mit der Eigenschaft, daß sowohl der Graph als auch sein Komplement kritisch perfekt sind, konnte bewiesen werden: Perfektheit ist eine *elusive* Grapheigenschaft [10]. Elusivität ist ein Komplexitätsmaß für Grapheigenschaften und besagt, daß auch der beste Algorithmus zum Erkennen dieser Eigenschaft die vollständige Information aus der Adjazenzmatrix des Graphen benutzen muß.

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 bezüglich der Facettenmenge des Stabile-Mengen-Polytops: verallgemeinere die Cliquebedingungen durch andere Ungleichungen und betrachte die Graphen, deren Stabile-Mengen-Polytop diese Ungleichungen als einzige nicht-triviale Facetten hat [9]. Eine natürliche Verallgemeinerung von Cliquebedingungen sind sogenannte Rangbedingungen, eine weitere Verallgemeinerung stellen geliftete Rangbedingungen dar. Die zwei entsprechenden Oberklassen perfekter Graphen sind *rang-perfekte Graphen* und *schwach rang-perfekte Graphen* [33]. Die Zugehörigkeit zu diesen beiden Klassen wurde für einige imperfekte Graphen untersucht, die aus perfekten Graphen durch Entfernen kritischer Kanten entstehen [31, 33, 35]. In der Literatur sind bereits einige Klassen rang-perfekter und schwach rang-perfekter Graphen bekannt, ein Überblick ist in [36] zu finden. Im vergangenen Jahr konnte gezeigt werden, daß Komplemente von Graphen mit zirkularer Struktur, sogenannte Antiwebs, rang-perfekt sind [37]. Hingegen sind Webs “hochgradig” nicht rang-perfekt [22, 23]. Eine offene Frage ist, ob Webs schwach rang-perfekt sind.

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 DFG-Forscherguppe “Algorithmen, Struktur, Zufall” untersucht.

### **Baumweite und Kombinatorische Optimierung**

**Bearbeitet von:** Arie Koster

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

Viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme sind für den Spezialfall eines Baumes als unterliegender Graph leicht lösbar (d. h. in polynomialer Zeit). Solche Resultate lassen sich häufig auf Graphen mit beschränkter *Baumweite* verallgemeinern. Die Baumweite eines Graphen kennzeichnet das Maß seiner Ähnlichkeit zu einem Baum. Die dazugehörige optimale *Baumzerlegung* des Graphen spiegelt diese Baumstruktur wider.

Obwohl viele kombinatorische Probleme für Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomialer Zeit lösbar sind [2], wurde bis vor kurzem angenommen, daß diese Resultate nur einen theoretischen Wert haben, da die Baumweite im Exponenten der Algorithmenlaufzeit erscheint. Es hat sich jedoch gezeigt, daß Algorithmen, die auf der Baumweite eines Graphen basieren, sich immer besser in der Praxis nutzen lassen [12, 15].

Diese Resultate haben dazu beigetragen, daß gemeinsam mit den Kooperationspartnern bei der NWO (Niederländische Organisation für Wissenschaft und Forschung) ein Projekt beantragt wurde, um die Verfahren zur Bestimmung der Baumweite weiterzuentwickeln und ferner ihren Einsatz zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme zu fördern. Anfang 2002 haben je ein Doktorand an der Universität Utrecht und der Universität Maastricht ihre Arbeit zu diesem Thema aufgenommen.

Im Rahmen dieses Projektes wurde im Berichtszeitraum zudem mit der Entwicklung einer C++-Software-Bibliothek zur Unterstützung der Implementierung und des Testens von Verfahren zur Ermittlung der Baumweite begonnen. Bislang wurden allgemeine Klassen zur Speicherung kombinatorischer Objekte sowie verschiedene Regeln zur Graphvereinfachung (vgl. [3]) und eine Vielzahl von Heuristiken (vgl. [13]) innerhalb dieses Frameworks implementiert. Ein weiterer wesentlicher Teil der Software-Bibliothek besteht in der Organisation von Testinstanzen verschiedener Herkunft in einem einheitlichen Format.

Zudem wurde im Berichtszeitraum ein verallgemeinertes Konzept der Baumweite untersucht. Dieses Konzept bezieht sich auf die Laufzeit des Algorithmus zur Bestimmung der “exact inference” in probabilistischen Netzen [15]. Für jeden Knoten im Graph ist eine bestimmte Anzahl von Zuständen gegeben. Für einen Knoten der Baumzerlegung wird die Laufzeit des Algorithmus bestimmt durch das Produkt der Anzahl verschiedener Zustände für alle dazugehörigen Graph-Knoten. Die Gesamtlaufzeit wird dann im Wesentlichen durch das Maximum dieser Produkte festgelegt. Die *gewichtete Baumweite* eines Graphen wird durch das Minimum dieser Maxima über al-

le Baumzerlegungen gegeben. In [7] werden Regeln zur Graphvereinfachung bzgl. gewichteter Baumweite vorgeschlagen und ihre Wirksamkeit anhand realistischer probabilistischer Netze gezeigt. Es hat sich herausgestellt, daß durch Einsatz dieser Regeln bessere Baumzerlegungen (hinsichtlich der Gewichtung) gefunden werden können.

### **Polyedrische Unterteilungen**

**Bearbeitet von:** Jörg Rambau

**Kooperationspartner:** 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 einer solchen Zerlegung Simplexe, so spricht man von einer Triangulierung. Topologische Unterteilungsräume, die aus Unterteilungshalbordnungen konstruiert werden können, erlauben eine vereinheitlichte Darstellung verschiedener Phänomene aus Ordnungstheorie, Modelltheorie und Diskriminantentheorie [25, 29]. 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.

Seit 2000 steht die Weiterentwicklung des Programmpakets TOPCOM im Mittelpunkt dieses Projektes [26, 27]. In 2002 wurde das auf orientierten Matroiden beruhende Konzept veröffentlicht und die Laufzeitkomplexität der implementierten Algorithmen dokumentiert [24, 30]. Ferner wurde die Distribution gepflegt (Anpassung an neue Compiler-Versionen etc.).

Für 2003 ist geplant, eine Schnittstelle von TOPCOM zu CaTS zu schaffen: CaTS berechnet den *Gröbner-Fächer* (Kegel entsprechen Gröbner-Basen) einer Punktconfiguration. Dieser Fächer verfeinert den *Sekundärfächer* (Kegel entsprechen Polyedrischen Unterteilungen). Die Berechnung des Gröbner-Fächers kann nun mit TOPCOM und CaTS in zwei Stufen geschehen: TOPCOM berechnet zunächst den Sekundärfächer, danach berechnet CaTS separat für jeden Kegel im Sekundärfächer die Verfeinerung durch den Gröbner-Fächer. Da TOPCOM im Gegensatz zu CaTS Symmetrien ausnutzen kann, erwarten wir für symmetrische Punktconfigurationen eine Beschleunigung der Berechnung des Gröbner-Fächers.

In diesem Projekt entsteht ein Lehrbuch zusammen mit Jesús De Loera und Francisco Santos. Ein Vorlesungsskriptum (in deutsch) zu einer Lehrveranstaltung zu diesem Thema an der TU Berlin ist bereits erhältlich [28].

### **Triangulierte Mannigfaltigkeiten**

**Bearbeitet von:** Frank H. Lutz

**Kooperationspartner:** Anders Björner (KTH, Stockholm, Schweden); Ulrich Brehm (TU Dresden); Michael Joswig, Ekkehard G. Köhler (TU Berlin); Wolfgang Kühnel

(Universität Stuttgart)

In den Anfangszeiten der Topologie wurden Mannigfaltigkeiten vorwiegend anhand ihrer Triangulierungen untersucht. Insbesondere die Berechnung von Invarianten nutzte die zugrundeliegende kombinatorische Struktur, während später zunehmend algebraische Methoden Einzug fanden. Obgleich es sich herausstellte, daß nicht jede topologische Mannigfaltigkeit 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.

Die explizite Konstruktion einzelner Triangulierungen (siehe beispielsweise [19] und die Abbildungen 2.29 und 2.30) oder von Serien von Triangulierungen ist der Ausgangspunkt für die weitere Untersuchung des Raumes aller möglichen Triangulierungen einer bestimmten Mannigfaltigkeit. Im Jahr 2002 konnte ein algorithmisches Verfahren zur Gewinnung triangulierter Seifert-Mannigfaltigkeiten, einer wichtigen Klasse 3-dimensionaler Mannigfaltigkeiten, entwickelt und implementiert werden [6]. Die Eckenanzahl der resultierenden Triangulierungen wächst hierbei linear mit den die Mannigfaltigkeit definierenden Seifert-Invarianten. Zudem konnte eine Serie beinahe nachbarschaftlicher zentralsymmetrischer 3-Sphären mit eckentransitiver zyklischer Gruppenwirkung konstruiert werden [20].

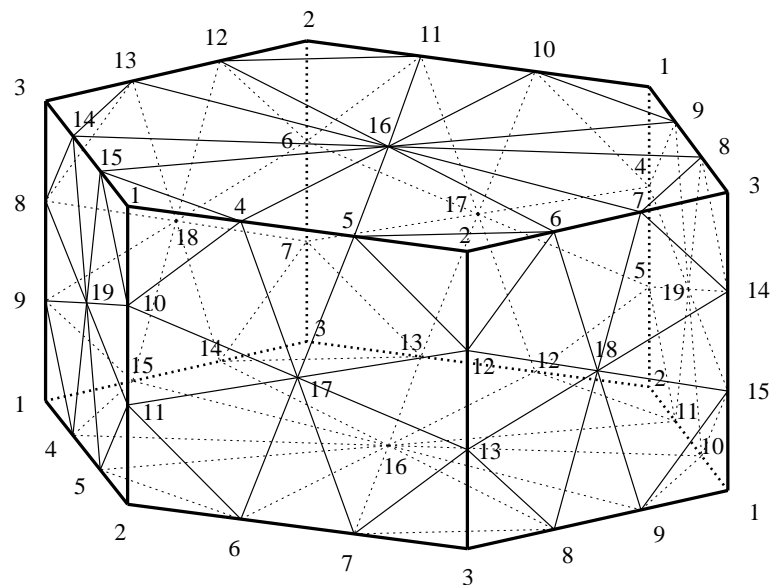


ABBILDUNG 2.29: Der Prismenraum  $P(3)$ .

Mit Hilfe *bistellarer Operationen* lassen sich gegebene Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten lokal, unter Erhaltung des  $PL$ -Homöomorphietyps, modifizieren. Be-

trachtet 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 [16] gewonnen werden [1, 14, 17].

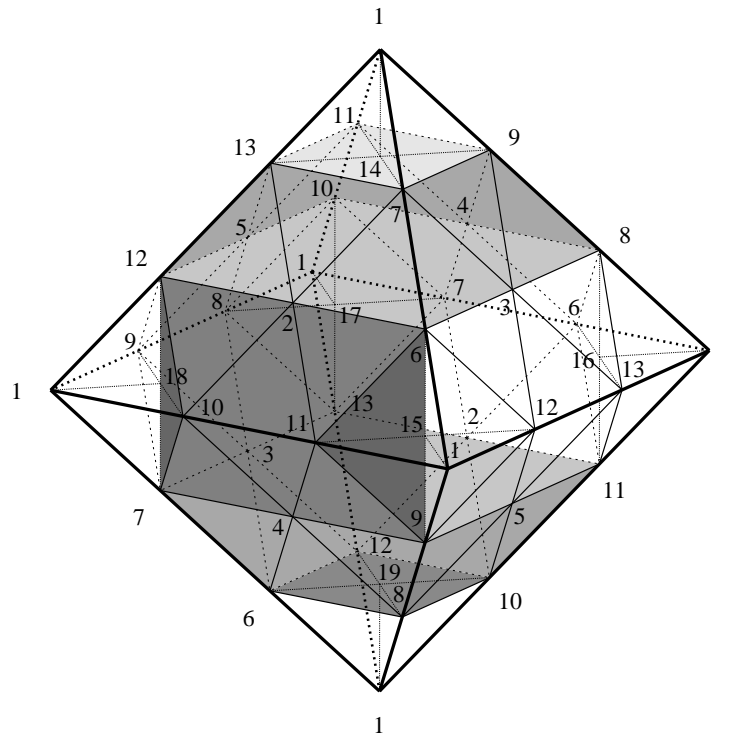


ABBILDUNG 2.30: Der Oktaederraum.

Systematischer in der Herangehensweise, wenn auch exponentiell in der Berechnung, ist es, Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig zu enumerieren. Dies wurde beispielsweise für eckentransitive Triangulierungen auf bis zu 13 Ecken (in allen dabei möglichen Dimensionen) durchgeführt, wobei einige neue interessante Beispiele entdeckt wurden [11, 17]. Das ursprünglich entwickelte Enumerationsprogramm konnte im Jahr 2001 massiv beschleunigt und im Jahr 2002 u. a. zur Enumeration aller 249.015 triangulierten 3-Mannigfaltigkeiten auf 10 Ecken eingesetzt werden, wobei 518 eckenminimale Triangulierungen von  $S^2 \times S^1$  gefunden wurden [21].

Für das Jahr 2003 steht im Rahmen des Projekts eine Reihe von Veröffentlichungen zur Fertigstellung an, insbesondere das im Berichtsjahr wesentlich vorangeschrittene Buchprojekt “Triangulated Manifolds”. Zugehörige Datensammlungen sind bereits online erhältlich unter [18].

## **Diskrete Mathematik für die Schule**

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Brigitte Lutz-Westphal

**Kooperationspartner:** Lisa Hefendehl-Hebeker (Universität Duisburg-Essen); Jürg Kramer (HU Berlin); Kurt Mehlhorn (Max-Planck-Institut Saarbrücken); Algorithmic Solutions Software GmbH Saarbrücken; Geschwister-Scholl-Schule Tübingen; Herder-Oberschule Berlin; Romain-Rolland-Oberschule Berlin; Wildermuth-Gymnasium Tübingen

**Förderung:** Volkswagen-Stiftung

Im Mathematikunterricht an der Schule wird kaum Diskrete Mathematik behandelt, obwohl dieser Zweig der Mathematik in Forschung und Praxis von großer Bedeutung ist. Insbesondere ist der Teilbereich der Kombinatorischen Optimierung in der Schule bislang nahezu unbekannt. Dafür, daß sich dies ändern sollte, sprechen etliche Gründe.

Zunächst einmal überzeugt der starke Anwendungsbezug. An vielen Stellen im Alltag profitieren wir vom Einsatz von Diskreter Mathematik, z. B. wenn die Busse pünktlich fahren, die Müllabfuhr kommt oder beim Telefonieren. Solche Themen sind für Schülerinnen und Schüler nicht nur interessant und motivierend, sondern bieten auch den Vorteil, daß relativ wenige bis gar keine Vorkenntnisse erforderlich sind. Die Fragestellungen an sich sind spontan verständlich. Man möchte beispielsweise so schnell wie möglich mit der U-Bahn ans Ziel kommen oder dem Postzusteller unnötige Wege ersparen. Erste Lösungsvorschläge können gemacht werden, ohne daß viele Fachbegriffe notwendig sind. Dies ermöglicht einen unbefangenen Zugang zu den Themen und setzt kreative Denkprozesse in Gang. Ein problemorientierter Unterricht liegt mit diesen Themen auf der Hand. Die Schülerinnen und Schüler erfahren dabei, wie sich aus einer anwendungsbezogenen Fragestellung heraus eine mathematische Theorie entwickeln kann.

Die Methoden der Diskreten Mathematik unterscheiden sich stark von denen der traditionell unterrichteten Stoffgebiete. Schülerinnen und Schüler lernen hier algorithmisches Denken und neue Argumentations- und Sichtweisen. Zudem steht mathematische Modellbildung am Beginn jeder Optimierung. Die Zerlegung von komplexen Sachverhalten in kleinere Teilprobleme ist eine Strategie, die hier häufig gebraucht wird und die die Fähigkeit zum allgemeinen Problemlösen fördert (viele dieser Modelle basieren auf Graphen, siehe Abbildung 2.31).

Das Ziel des Projektes ist, Themen der Kombinatorischen Optimierung für den Unterricht an Schulen zugänglich zu machen. In erster Linie werden Unterrichtsmaterialien entwickelt, d. h. Arbeitsmaterial für die Schülerinnen und Schüler sowie verständliche Darstellungen der Themen für die Lehrkräfte. Letzteres ist besonders wichtig, da mit diesen Themen auch ein methodischer Ansatz verfolgt wird, der besonderes Augenmerk auf eine aktive Rolle der Schülerinnen und Schüler legt. Das bedeutet, daß die Arbeitsmaterialien für den Unterricht nur Impulse zum Weiterdenken beinhalten und nicht den ganzen Stoff wiedergeben. Die inhaltliche Orientierung bietet dann das Material für die Lehrerinnen und Lehrer. Die Materialien werden in Unterrichtsversuchen erprobt.

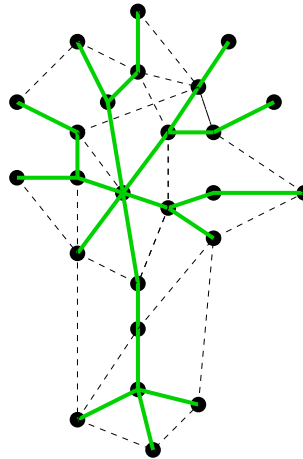


ABBILDUNG 2.31: Ein Begriff wird deutlich: ein aufspannender Baum in einem Graphen.

Die ersten Unterrichtsversuche fanden im November und Dezember 2002 in den Tübinger Kooperationsschulen statt. In einer 8. Klasse wurden Minimale Aufspannende Bäume anhand der Planung von Telefonnetzen behandelt. In einer 9. Klasse wurde das Chinesische Postbotenproblem durchgenommen. Die Rückmeldung von Schülerseite war außerordentlich positiv. Die Erwartungen von unserer Seite an die förderlichen Aspekte des Stoffes wurden erfüllt. Von Lehrerseite gibt es ein großes Interesse an den Themen, u. a. auch deshalb, weil mit diesen “unverbrauchten” Inhalten neues Interesse an der Mathematik geweckt werden kann. Sobald erste Teile des Unterrichtsmaterials fertiggestellt sein werden, werden weitere Unterrichtsversuche durch andere Lehrerinnen und Lehrer durchgeführt. Als weitere Themen sind geplant: Kürzeste Wege, das Traveling-Salesman-Problem, Färbungen, Flüsse in Netzwerken.

Parallel zur Entwicklung des Materials wird versucht, Diskrete Mathematik in den Lehrplänen zu verankern. In Berlin und Baden-Württemberg wurden bereits Gespräche geführt, die auf eine Aufnahme in die neuen Lehr- bzw. Rahmenpläne hoffen lassen.

### Publikationen

- [1] 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.
- [2] H. L. Bodlaender, *A tourist guide through treewidth*, *Acta Cybernetica* **11**, Nr. 1–2 (1993), 1–21.



- [3] 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.
- [4] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [5] ———, *Combinatorial packing problems*, erscheint in: *The Sharpest Cut*, Festschrift in honor of Manfred Padberg’s 60th birthday (M. Grötschel, Hrsg.), SIAM.
- [6] U. Brehm und F. H. Lutz, *Triangulations of Seifert manifolds*, in Vorbereitung.
- [7] F. van den Eijkhof, H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe reduction rules for weighted treewidth*, Report 02-49, ZIB, 2002.
- [8] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [9] ———, *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [10] S. Hougardy und A. Wagler, *Perfectness is an Elusive Graph Property*, Report 02-11, ZIB, 2002.
- [11] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Combinatorial manifolds with transitive automorphism group on few vertices*, Manuskript, 1999.
- [12] A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment – Models and Algorithms*, Dissertation, Universiteit Maastricht, 1999, elektronisch<sup>1</sup> erhältlich.
- [13] A. M. C. A. Koster, H. L. Bodlaender und C. P. M. van Hoesel, *Treewidth: computational experiments*, Report 01-38, ZIB, 2001.
- [14] W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, *Periodica Mathematica Hungarica* **39** (1999), 161–183.
- [15] 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.
- [16] F. H. Lutz, *GAP-program BISTELLAR*, Version 05/2002, online<sup>2</sup> erhältlich, 1997–2002.

---

<sup>1</sup><http://www.zib.de/koster/thesis.html>

<sup>2</sup><http://www.math.TU-Berlin.de/diskregeom/stellar/bistellar.tar.gz>

- [17] ———, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [18] ———, *The Manifold Page*, online<sup>3</sup>, 2000–2003.
- [19] ———, *Császár's torus*, Electronic Geometry Model No. 2001.02.069, 2002, online<sup>4</sup> verfügbar.
- [20] ———, *A series of nearly neighborly centrally symmetric 3-spheres with cyclic group action on  $4m$  vertices*, in Vorbereitung.
- [21] ———, *Combinatorial 3-manifolds with ten vertices*, in Vorbereitung.
- [22] G. Oriolo, *Clique family inequalities for the stable set polytope for quasi-line graphs*, erscheint in: Special Issue of Discrete Applied Mathematics on Stability Problems (V. Lozin und D. de Werra, Hrsg.).
- [23] A. Pêcher und A. Wagler, *On non-rank facets of stable set polytopes of webs with clique number four*, Report 03-01, ZIB, 2003.
- [24] J. Pfeifle und J. Rambau, *Computing triangulations using oriented matroids*, erscheint in: *Algebra, Geometry and Software Systems* (M. Joswig und N. Takayama, Hrsg.), Springer-Verlag, 2003.
- [25] J. Rambau, *Projections of Polytopes and Polyhedral Subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [26] ———, *TOPCOM—Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software unter der Gnu Public Licence, online<sup>5</sup> verfügbar, 1999–2003.
- [27] ———, *Point configuration and a triangulation without flips as constructed by Santos*, Electronic Geometry Model No. 2000.08.005, 2000, online<sup>6</sup> verfügbar.
- [28] ———, *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern*, Report 00-46, ZIB, 2000, Kursskriptum TU Berlin.
- [29] ———, *Circuit admissible triangulations of oriented matroids*, *Discrete & Computational Geometry* **27** (2002), 155–161.
- [30] ———, *TOPCOM: Triangulations of point configurations and oriented matroids*, *Mathematical Software—ICMS 2002* (A. M. Cohen, X.-S. Gao und N. Takayama, Hrsg.), World Scientific, 2002, 330–340.

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

<sup>4</sup><http://www.eg-models.de/2001.02.069>

<sup>5</sup><http://www.zib.de/rambau/TOPCOM>

<sup>6</sup><http://www.eg-models.de/2000.08.005>

- [31] A. Wagler, *Critical edges in perfect line graphs and some polyhedral consequences*, Discrete Applied Mathematics **95** (1999), 455–466.
- [32] ———, *On critically perfect graphs*, Journal of Graph Theory **32** (1999), 394–404.
- [33] ———, *Critical Edges in Perfect Graphs*, Cuvillier, Göttingen, 2000, Dissertation, TU Berlin.
- [34] ———, *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-Verlag, 2001, 317–327.
- [35] ———, *Rank-perfect and weakly rank-perfect graphs*, Mathematical Methods of Operations Research **95** (2002), 127–149.
- [36] ———, *Relaxing perfectness: Which graphs are almost perfect?*, Report 02-03, ZIB, 2002, erscheint in: *The Sharpest Cut*, Festschrift in honor of Manfred Padberg's 60th birthday (M. Grötschel, Hrsg.), SIAM.
- [37] ———, *Antiwebs are Rank-Perfect*, Report 02-07, ZIB, 2002.

### 2.2.9 Telekommunikation

Telekommunikation stellt die Schlüsseltechnologie der sich zunehmend entwickelnden Informationsgesellschaft dar. Trotz des wachsenden Konkurrenzdruckes zeichnet sich die Branche durch eine anhaltend hohe Innovationsrate sowohl im Hinblick auf die bereitgestellten Anwendungen als auch die in den Netzen eingesetzten Technologien aus. UMTS bietet hierfür ein plakatives Beispiel. Denn insbesondere die Netzbetreiber müssen die vorhandenen Kapazitäten effizient nutzen und sorgfältig planen.

Die Telekommunikation bietet daher ein fruchtbares Anwendungsfeld für mathematische Optimierungsverfahren. Im Rahmen dieses Schwerpunktes untersuchen wir vor allem praxisrelevante Problemstellungen aus verschiedenen Bereichen der Netzplanung und -analyse und entwickeln dafür geeignete Lösungsmethoden. Darüber hinaus erfolgt innerhalb des DFG-Forschungszentrums "Mathematik für Schlüsseltechnologien" auch die vertiefte Behandlung grundlegender Themen.

#### **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 "Quality of Service" (QoS) eine fundierte Dimensionierung der Links für die Mobilfunkzellen not-

wendig ist. Aufbauend auf schon entwickelte Algorithmen zur Dimensionierung eines einzelnen Links einer Mobilfunkzelle wurden effiziente Algorithmen unter Einbeziehung von Trunk-Reservierung, die der Priorisierung von Handover-Calls dient, hergeleitet und implementiert. 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 Aufspaltungsformeln 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. [6, 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, wurde die Güte der bekannten Aufspaltungsformeln für die ersten beiden Momente der Abgangsströme eines Links studiert. Für die Aufspaltung der Varianzen des vom Link akzeptierten sowie des nicht akzeptierten Verkehrs wurden für Links ohne und für Links mit Trunk-Reservierung neue Verfahren entwickelt.

### **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)

Wissenschaft, Forschung und Bildung in Deutschland kommunizieren über eines der weltweit modernsten Datennetze, das Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN. Es wird von ca. 550 Einrichtungen genutzt. Das im G-WiN übertragene Datenvolumen lag im Juli 2002 bei etwa 770 TeraBytes pro Monat.

Für zwei wesentliche Planungsprobleme bei der Konfiguration und im Betrieb des G-WiN, das Clustering und die Kernnetzoptimierung, wurden in diesem Projekt mathematische Modelle und Optimierungsverfahren entwickelt [3, 4].

Die Aufgabe beim Clustering ist die Auswahl und Konfiguration geeigneter Kernnetzstandorte sowie die Anbindung der Anwenderstandorte an diese Kernnetzstandorte. Diese Wahl ist von entscheidender Bedeutung für die Gesamtplanung, weil sie Auswirkungen auf 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. Vor allem zwei Aspekte sind dabei von

zentraler Bedeutung: die Ausfallsicherheit des Netzes und die Verwendung des OSPF-Protokolls, welches die Art und Weise definiert, wie Verkehrsströme im Netz geroutet werden.

Die polyedrischen Methoden zur Kernnetzoptimierung wurden im Berichtszeitraum erheblich weiterentwickelt. Primäres Ziel dabei war, für praktische Probleminstanzen schneller gute Lösungen zu finden. Dazu wurden unter anderem neue primale Heuristiken entwickelt und implementiert, die Branching-Regeln besser mit den primalen Heuristiken abgestimmt sowie verschiedene Modellvereinfachungen analysiert und praktisch getestet.

Für die im Vorjahr entworfenen Dekompositionsansätze zur Kernnetzoptimierung wurden konkrete Algorithmen entwickelt und implementiert. Die erwarteten Ergebnisse zu Laufzeitverhalten und Lösungsqualität wurden bei zahlreichen Tests bestätigt. Mit einem dieser Ansätze konnten nicht nur deutlich größere Probleminstanzen als mit den polyedrischen Methoden gelöst werden, es war sogar möglich, das Clustering und die Kernnetzdimensionierung für die G-WiN Daten gemeinsam in einem integrierten Modell zu lösen.

Ende des Jahres wurde damit begonnen, die bisher nur für die Planung einzelner Momentaufnahmen des Netzes entworfenen Methoden bezüglich ihrer Tauglichkeit zur längerfristigen und mehrere Zeithorizonte überspannenden Netzplanung zu evaluieren. Die Ergebnisse dieser Auswertung können die Grundlage für mögliche neue Ansätze zur langfristigen Mehrperiodenplanung sein.

### **Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze**

**Bearbeitet von:** Arie Koster, Roland Wessälly, Adrian Zymolka

**Kooperationspartner:** DFN-Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (Berlin), T-Systems Nova GmbH (Berlin), Telekom Austria AG, (Wien, Österreich)

Moderne Telekommunikationsnetze basieren zunehmend auf optischer Technologie. Die erzielbaren Übertragungsraten liegen wesentlich höher als bei elektronischen Signalen. 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. Zu den modernsten Bausteinen gehören *Optical Cross-Connects* (OXCs). Das sind optische Schalter in den Netzknoten, bei denen das durchlaufende Signal zur Weitervermittlung nicht mehr wie zuvor in elektronische Form umgewandelt werden muß. Durch die Integration dieser Schalteinheiten innerhalb der Netze entstehen durchgängige optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden.

Für Netzbetreiber stellt sich bei der Planung optischer Netze die Aufgabe, zu gegebenen Verkehrsbedarfen eine Konfiguration der zu installierenden Hardwarekomponenten sowie der Lichtwege zu ermitteln, die die Gesamtkosten des Netzes minimiert. Zusätzlich sind Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen, um auch

bei Störfällen noch einen festgelegten Mindestverkehr garantieren zu können. Für dieses Optimierungsproblem werden zum einen effiziente mathematische Verfahren benötigt, mit denen sich geeignete Netzkonfigurationen berechnen lassen. Zum anderen lassen sich durch den Vergleich verschiedener Netzszenarien die Auswirkungen unterschiedlicher Technologie-Entwicklungen auf die Planung und das Management optischer Netze erkunden. In einem weiteren Projekt innerhalb der Abteilung Optimierung wird gleichzeitig das dynamische Netzverhalten bei sich zeitlich änderndem Verkehr untersucht (siehe Projekt *Dynamische Konfiguration optischer Kommunikationsnetze*).

Im Berichtszeitraum lag der Fokus der Projektarbeit vor allem auf der Weiterentwicklung eines für das Konfigurationsproblem hergeleiteten Lösungsverfahrens. Dieses beruht auf einem Dekompositionsansatz, bei dem zwei aufeinanderfolgende Teilprobleme betrachtet werden.

Aufgrund der engen Kopplung beider Aspekte umfaßt das erste Teilproblem das Routing der Lichtwege sowie die Dimensionierung der dazu notwendigen Kapazitäten. Für diese Aufgabe lassen sich wegen der Ähnlichkeit zur bisherigen Netzplanung bereits vorhandene Verfahren einsetzen (vgl. [21]). Auf Basis dieser Methoden sind Algorithmen für die in optischen Netzen mathematisch anspruchsvollere Aufgabe entwickelt worden. Ferner wurde ein speziell für optische Netze geeignetes Ausfallsicherheitskonzept entwickelt und integriert, das eine bedarfsindividuelle Skalierbarkeit des Ausfallschutzes ermöglicht und ressourcenschonend realisierbar ist.

Im zweiten Teilproblem ist für die resultierenden Lichtwege eine konfliktfreie Wellenlängenzuordnung zu ermitteln. Konverter erlauben es, innerhalb eines Lichtweges die Wellenlänge zu wechseln. Aufgrund der damit verbundenen Kosten ist die Anzahl notwendiger Konverter zu minimieren. Im Berichtszeitraum wurde eine geeignete Formulierung als ganzzahliges lineares Programm erarbeitet und mit dessen Untersuchung begonnen. Zudem ließ sich die Güte der heuristisch generierten Lösungen mittels eines iterativen Ansatzes wesentlich steigern.

Unser Verfahren (vgl. [22]) wurde zudem zur Durchführung ausgedehnter Vergleichsstudien herangezogen. In Kooperation mit unseren Projektpartnern sind auf realistischen Instanzen zahlreiche Szenarien untersucht worden, die sich mit Hilfe des flexiblen, komponentenbasierten Netzmodells abbilden lassen. Bezüglich des Einsatzes unterschiedlicher Technologien deuten die Ergebnisse zum einen an, daß transparente optische Systeme gegenüber semitransparenten und opaquen Netztypen zu favorisieren sind. Zum anderen ließ sich der Einfluß von Langstreckenübertragungssystemen und verschiedenen Ausfallsicherheitskonzepten abschätzen. Die Telekom Austria AG setzt unser Verfahren mittlerweile als Planungstool für optische Netze in der Praxis ein.

### **Last-Ausgleichung innerhalb von Signaling Transfer Points**

**Bearbeitet von:** Arie Koster

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

Ohne Signalisierung ist im wesentlichen keine Telekommunikation möglich. Vor, während und nach einem Telefonat werden Signalisierungsnachrichten versandt, um die Verbindung herzustellen, die Kommunikation reibungslos verlaufen zu lassen und die Abrechnung sicherzustellen.

Für die Signalisierung wird neben dem eigentlichen Telekommunikationsnetz ein separates Signalisierungsnetz betrieben, woran hohe Anforderungen bzgl. der Ausfallsicherheit gestellt werden. Diese Vorgaben gelten insbesondere auch für die Routingfunktionalität innerhalb größerer Signalisierungsnetze, welche durch den sogenannten Signaling Transfer Points (STPs) übernommen wird.

Die Robustheit eines STPs wird in erheblichem Maße durch die Verteilung der Verkehrslast auf die einzelnen Routingprozessoren des STPs bestimmt. Jedem Routingprozessor ist eine Menge von Verbindungen zugewiesen, und die gesamte Verkehrslast dieser Verbindungen bestimmt die Last eines Routingprozessors.

Durch den Ausfall von Verbindungen, einzelner Routingprozessoren oder eines kompletten STP werden Schwankungen in den Verkehrslast verursacht. Der Verkehr vom Ausfall betroffener Verbindungen wird in solch einer Situation durch vordefinierte, noch funktionierende Verbindungen übernommen. Hierdurch steigt die Verkehrslast dieser Verbindungen erheblich an. Um zu vermeiden, daß Routingprozessoren überlastet werden, sollte die Last im Normalfall so gut wie möglich über die Routingprozessoren verteilt sein.

Damit die Zuverlässigkeit eines STPs stets gewährleistet ist, muß die Zuweisung der Verbindungen an den Routingprozessoren regelmäßig überprüft werden. Die Verkehrslast einer Verbindung ändert sich nämlich ständig, nicht nur über den Tag, sondern auch längerfristig durch ein sich veränderndes Verkehrsaufkommen, die Bereitstellung neuer Verbindungen, usw. Für die Bestimmung einer neuen, wiederum ausgeglichenen Konfiguration ist zu beachten, daß diese nicht zu stark von der bisherigen abweicht, da für jede Umschaltung die betroffene Verbindung für einige Zeit ausfällt.

Die Rekonfigurationsaufgabe läßt sich mittels mathematischer Optimierung beschreiben und lösen [17]. Im Berichtszeitraum wurde das Optimierungsmodell um anfänglich nicht berücksichtigte Bedingungen erweitert (siehe [13]). Das Projekt ist damit abgeschlossen. Die Fa. Atesio hat die weitere Vermarktung ihres auf diesen Ergebnissen entwickelten Programmes für STP-Lastausgleichung aufgenommen.

### **FAP Web**

**Bearbeitet von:** Andreas Eisenblätter, Arie Koster

Im Jahr 2000 wurde das FAP Web [12] eingerichtet. Dabei handelt es sich um ein

Internet-basiertes Informations- und Datenangebot für Forscher, die im Bereich Algorithmenentwicklung für Frequenzzuweisungsprobleme tätig sind. Neben der Beschreibung mehrerer Varianten von Frequenzzuweisungsproblemen, vgl. [10], stehen auch praxisnahe Testdaten einschließlich Referenzlösungen zu Forschungszwecken zur Verfügung.

Der Inhalt des FAP Webs geht ursprünglich aus den Promotionen von Arie Koster [16] und Andreas Eisenblätter [8] sowie der Mitarbeit im EU COST 259 Projekt [7] hervor. Während des Berichtszeitraumes sind mehrmals Aktualisierungen und Erweiterungen des Angebotes vorgenommen worden, das nach wie vor rege in Anspruch genommen wird.

## MOMENTUM

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

**Kooperationspartner:** Atesio GmbH (Berlin), E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf), KPN Reseach (Leidschendam, Niederlande), Siemens AG (Berlin), Technische Universität Darmstadt, Technische Universität Lissabon (Portugal), Vodafone Telecel (Lissabon, Portugal)

**Förderung:** EU Projekt MOMENTUM, IST-2000-28088

Mit der Einführung von Mobilfunknetzen nach UMTS-Standard sind völlig neue planerische Herausforderungen verbunden [15]. Ließ sich zum Beispiel bei GSM die Netzabdeckung noch weitgehend unabhängig von der Netzkapazität planen, so sind diese beiden Aspekte bei UMTS untrennbar verwoben. 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 [19].

Das europäische Projekt MOMENTUM, ein Akronym für *Models and Simulations for Network Planning and Control of UMTS*, setzt an diesem Punkt an [18]. Es werden Techniken und Algorithmen für die Planung und Optimierung der UMTS-Funkschnittstellenkonfiguration entwickelt, die künftig Eingang in die Planungs- und Optimierungswerkzeuge der Netzbetreiber finden sollen. Entsprechend dieser Zielsetzung sind neben mathematischen und nachrichtentechnischen Forschungsgruppen auch ein Systemtechniklieferant und drei Netzbetreiber an dem Projekt beteiligt.

Im Berichtszeitraum hat das ZIB wesentlich an der Entwicklung eines mathematischen Optimierungsmodelles für die Netzkonfiguration mitgewirkt [11]. Für Planungsprobleme mit wenigen Basisstationsstandorten lassen sich mit Hilfe dieses Modelles bereits optimierte Netzkonfigurationen berechnen, siehe Abbildung 2.32. In der verblei-



benden Projektlaufzeit (bis voraussichtlich 31.07.2003) wird das Basismodell weiter verfeinert. Einfache heuristische Ansätze sollen es ermöglichen, größere Netzkonfigurationen zu optimieren. Die Entwicklung leistungsfähiger Optimierungsverfahren geschieht im Rahmen des DFG-Forschungszentrums (siehe S. 97).

Ergänzend war das ZIB wesentlich an dem Entwurf eines XML-Schemas zur strukturierten Speicherung von Ein- und Ausgabedaten für die Netzplanung sowie der Entwicklung eines parallelen dynamischen Simulators beteiligt.

### **Optimierung in der Telekommunikation: Integrierte Planung von Multi-Level/Multi-Layer Netzen**

**Bearbeitet von:** Andreas Bley, Roland Wessälly

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien"

Der Aufbau eines modernen Kommunikationsnetzes ist durch eine hierarchische Unterteilung in Kernnetz und Zugangnetz gekennzeichnet. Diese beiden Netze sind sowohl intern als auch untereinander über logische Verbindungen gekoppelt. Jedes dieser Teilnetze ist für eine Schicht des sogenannten Protokollstacks zu planen. In einem Datennetz wird beispielsweise das IP-Netz in das ATM-Netz eingebettet, welches selbst in das SDH-Netz eingebettet wird, welches schließlich in das WDM-Netz eingebettet wird (siehe Abbildung 2.33). Das Netzplanungsproblem für eine Schicht umfaßt dabei Entscheidungen zur Topologie (Standorte mit logische Verbindungen), Konfiguration der Hardware (Router, Cross-Connects und Interface-Karten) und Routing aller Kommunikationsbedarfe unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheitsanforderungen.

Aus mathematischer Sicht hat sich die Planung von Kommunikationsnetzen innerhalb des vergangenen Jahrzehntes von der reinen Topologieplanung [20, 14] hin zur integrierten Planung einer gesamten Netzschicht [1, 2, 21] entwickelt. Die zugehörigen mathematischen Modelle und Methoden für eine einzelne Netzschicht, aber auch für die Hierarchieentscheidung [3] sind in ausreichendem Maße entwickelt.

Innerhalb des DFG-Forschungszentrums werden mathematische Modelle und Lösungsverfahren zur integrierten Planung mehrerer Netzhierarchien und -schichten entwickelt. Insbesondere werden Ausfallsicherheitsanforderungen über Protokollschichten hinweg betrachtet. Dieses Problem ist für die Netzbetreiber von zunehmender Wichtigkeit, um weitere Kostenreduktionen durch intelligenteren Einsatz vorhandener Ressourcen zu realisieren. Die vielen technologischen Nebenbedingungen, Protokolleigenschaften und Abhängigkeiten zwischen den Entscheidungen sind mitverantwortlich für die resultierenden großen und komplexen diskreten mathematischen Optimierungsmodelle. Wir streben die Fortentwicklung von Methoden der ganzzahligen Optimierung an, um die sich abzeichnenden Modelle approximativ lösen und somit entsprechende Kostenreduktionen aufzeigen zu können.

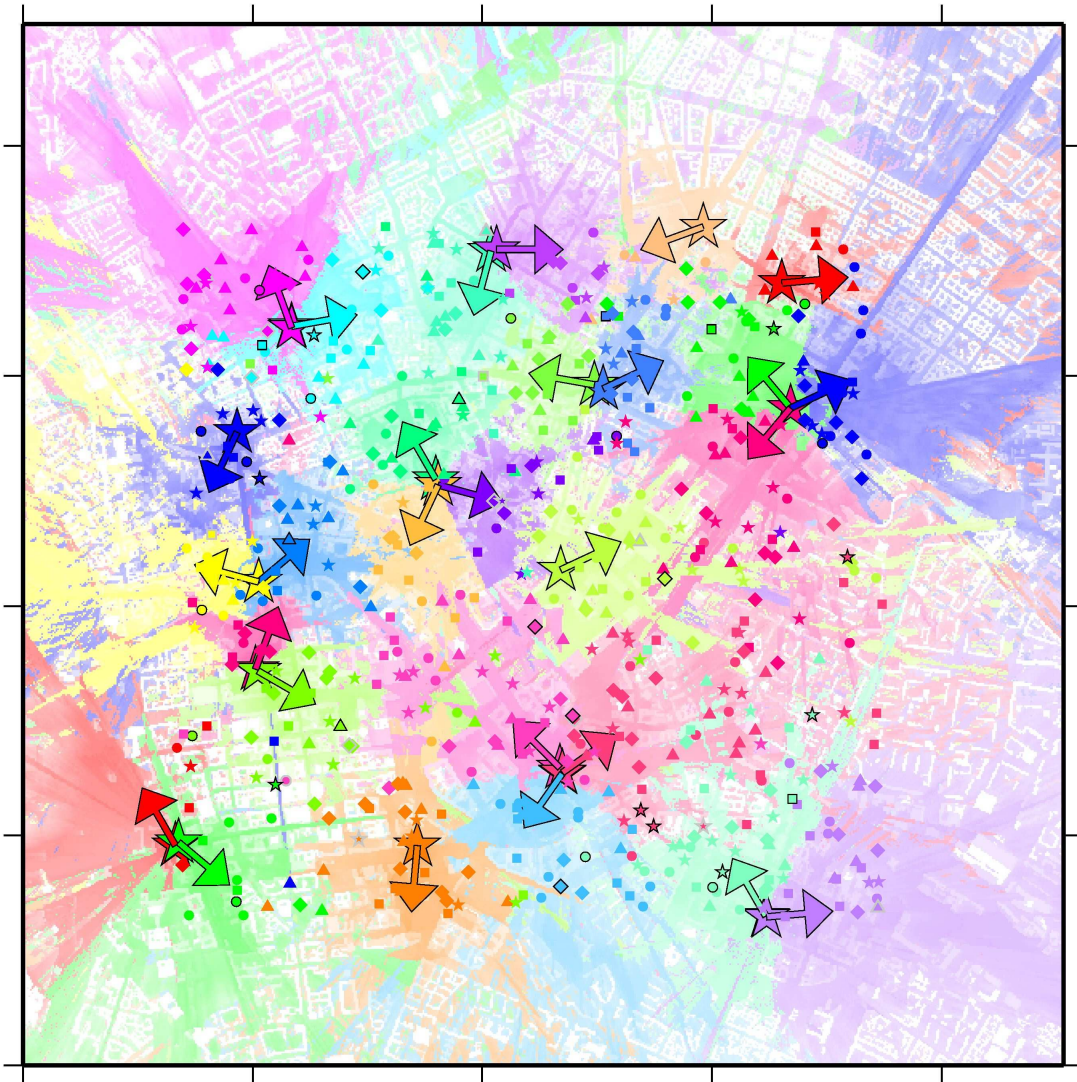


ABBILDUNG 2.32: Optimierte Auswahl von Standorten und Antennenrichtungen zur Versorgung des Alexanderplatzes in Berlin und seiner nahen Umgebung. (Die zugrundeliegenden Pfadverlustberechnungen mit 5 m Auflösung wurden von der E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG zur Verfügung gestellt.) Die Darstellung zeigt für die 15 ausgewählten Standorte jeweils die Richtungen der zu installierenden Antennen. Die Versorgungsbereiche der Zellen sind farblich gegeneinander abgesetzt. Die Optimierung erfolgte auf der Basis von fünf zufälligen Nutzeranordnungen, wobei etwa jeweils 90% der Nutzer klassisch telefonieren, 7% Videotelefonie und 3% Streaminganwendungen (Paketdatenübertragung auf das Nutzergerät) nutzen. Innerhalb einer Anordnung werden die Nutzungstypen durch ihre Ränder unterschieden (keiner, dünner schwarzer, dicker grauer); für die verschiedenen Anordnungen werden unterschiedliche Symbolformen verwendet.

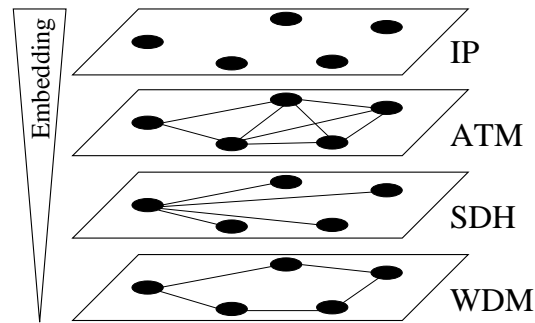


ABBILDUNG 2.33: Schichtenmodell in der Netzplanung

### Optimierung in der Telekommunikation: Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle

**Bearbeitet von:** Andreas Eisenblätter, Gunnar W. Klau

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”

Ein Teilaspekt des von der Europäischen Union geförderten Projekts MOMENTUM [18] befaßt sich mit der Planung und optimalen Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle (siehe 2.2.9). Obwohl der Fokus innerhalb von MOMENTUM eher auf Modellbildung, Datenmanagement und Definition der Schnittstellen liegt, können mit Standardverfahren und einfachen Heuristiken bereits eindrucksvolle Ergebnisse erzielt werden (siehe Abbildung 2.32).

Die Größe einer Instanz des Planungsproblems der UMTS-Schnittstelle wird im wesentlichen durch die folgenden Parameter charakterisiert:

1. Anzahl der möglichen Standorte;
2. Anzahl der möglichen Konfigurationen pro Standort;
3. Anzahl der Benutzer pro Momentaufnahme;
4. Anzahl der betrachteten Momentaufnahmen.

Praxisrelevante Größenordnungen sind typischerweise in jedem dieser Parameter um ein Vielfaches größer als beim in Abbildung 2.32 dargestellten Beispiel. Für solche Instanzen produzieren Standardverfahren keine Lösungen mehr.

Das Ziel dieses Projektes ist es, für die in der Praxis auftretenden Planungsprobleme nachweisbar gute Lösungen zu produzieren. Hierzu werden verschiedene Wege untersucht, die Komplexität dieses *large-scale*-Optimierungsproblems mit stochastischen Eingabedaten in den Griff zu bekommen:

- Analyse der auftretenden Teilprobleme;
- Untersuchung von Dekompositionsstrategien zur Zerlegung des Ausgangsproblems;

- Entwicklung neuer Strategien zur Lösung der Teilprobleme.

Im Berichtszeitraum wurde ein Java-Prototyp entwickelt, mit dem mit Hilfe lokaler Suchverfahren heuristische Lösungen generiert werden können. Die Software ist in der Lage, durch gemeinsame Schnittstellen mit im MOMENTUM-Projekt entwickelten und zukünftig entstehenden Werkzeugen kommunizieren.

### Publikationen

- [1] D. Alevras, M. Grötschel und R. Wessäly, *Cost-efficient network synthesis from leased lines*, Annals of Operations Research 76, 1–20, 1998.
- [2] A. Bley, M. Grötschel und R. Wessäly, *Design of broadband virtual private networks: Model and heuristics for B-WiN*, Robust Communication Networks: Interconnection and Survivability, Band 53, DIMACS series, 1–16. ISBN 0-8218-1546-6, 2000.
- [3] A. Bley und T. Koch, *Optimierung in der Planung und beim Aufbau des G-WiN*, DFN-Mitteilungen, Nr. 54, 13–15, 2000.
- [4] A. Bley und T. Koch, *Integer programming approaches to access and backbone IP-network planning*, Report 02-41, ZIB, 2002.
- [5] A. Brandt und M. Brandt, *Individual Overflow and Freed Carried Traffics for a Link with Trunk Reservation*, Report 01-35, ZIB, 2001.
- [6] \_\_\_\_\_, *On the Moments of the Overflow and Freed Carried Traffic for the GI/M/C/0 System*, Methodol. Comput. Appl. Probab. 4 (2002), 69–82.
- [7] 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.
- [8] A. Eisenblätter, *Frequency assignment in GSM networks: Models, heuristics, and lower bounds*, Dissertation, TU Berlin, Fakultät 2, 2001.
- [9] A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequency assignment and ramifications of coloring*, Report 00-47, ZIB, 2000.
- [10] A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequency assignment and ramifications of coloring*, Discussiones Mathematicae Graph Theory 22 (2002), Nr. 1, 51–88.
- [11] A. Eisenblätter, T. Koch, A. Martin, T. Achterberg, A. Fügenschuh, A. M. C. A. Koster, O. Wegel und R. Wessäly, *Modelling Feasible Network Configurations for UMTS*, Telecommunications Network Design and Management

- (G. Anandalingam und S. Raghavan, Hrsg.), Kluwer Academic Publishers, 1–24, 2002.
- [12] A. Eisenblätter und A. M. C. A. Koster, *FAP web*, 2000, <http://fap.zib.de>.
- [13] A. Eisenblätter, A. M. C. A. Koster, R. Wallbaum und R. Wessäly, *Load Balancing in Signaling Transfer Points*, Report 02-50, ZIB, 2002.
- [14] M. Grötschel, C. Monma und M. Stoer, *Design of survivable networks*, Band Network Models, Reihe *Handbooks in Operations Research and Management Science*, Kapitel 10, 617–672, North-Holland, 1995.
- [15] H. Holma und A. Toskala (Hrsg.), *WCDMA for UMTS*, John Wiley & Sons, 2001.
- [16] A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment – Models and Algorithms*, Dissertation, Universität Maastricht, 1999. <http://www.zib.de/koster/thesis.html>.
- [17] A. M. C. A. Koster, *Re-Optimization of Signaling Transfer Points*, Report 00-18, ZIB, 2000.
- [18] *MOMENTUM Projekt Webseite. 2001*, <http://momentum.zib.de>.
- [19] T. Novosad, J. Laiho und A. Wacker (Hrsg.), *Radio Network Planning and Optimization for UMTS*, John Wiley & Sons, 2001.
- [20] M. Stoer, *Design of Survivable Networks*, Lecture Notes in Mathematics, Band 1531, Springer, 1992.
- [21] R. Wessäly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Dissertation, TU Berlin. Cuvillier Verlag, ISBN 3-89712-864-0, 2000.
- [22] A. Zymolka, A. M. C. A. Koster und R. Wessäly, *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*, Report 02-34, ZIB, 2002.

### 2.2.10 Ganzzahlige Optimierung

Die Ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, in denen Güter oder Entscheidungen unteilbar sind. Ein Mitarbeiter kann einem Projekt entweder zugeteilt werden oder nicht, für Datenleitungen in der Telekommunikation stehen nur bestimmte diskrete Kapazitätsstufen wie 64 KBit, 2 MBit, 34 MBit usw. zur Auswahl, ein Speditionsunternehmen kann sich nicht 3,7 neue LKW anschaffen.

Solche Ganzzahligkeitsbedingungen führen auf *Gemischt-Ganzzahlige Programme* (MIPs).

Um MIPs 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 den 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, neue Problemstellungen in einfacher Weise modellieren und akzeptable Lösungen schnell finden zu können. 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*  
übertragen polyedrische Information zwischen verschiedenen kombinatorischen Optimierungsproblemen.
- *SteinLib Testdata Library*  
ist eine Problemsammlung von Steinerbaum-Problemen, das in vielen MIPs als Unterstruktur vorkommen.

### **Gemischt-Ganzzahlige Programmierung**

**Bearbeitet von:** Tobias Achterberg, Thorsten Koch

**Kooperationspartner:** Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt)

Der bisher erfolgreichste Ansatz zur Lösung von MIPs besteht im Einsatz eines sogenannten *Branch-and-Cut*-Verfahrens unter Verwendung der LP-Relaxierung. Dabei werden die Ganzzahligkeitsbedingungen zunächst ignoriert, 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 [7] am ZIB den Branch-and-Cut-Code SIP entwickelt, der zur Lösung der LPs den CPLEX [6] LP-Löser verwendet und sich in seiner Leistungsfähigkeit mit kommerziellen Codes messen kann.

Im Berichtsjahr wurden Verbesserungen in SIP implementiert, die erneut zu einer beachtlichen Effizienzsteigerung führten. Insbesondere wurden zusätzliche Separatoren und Primalheuristiken entwickelt, sowie die Branching-Strategie verbessert [1].

Problem	Knoten		Zeit (s)	
	SIP 1.3	CPLEX	SIP 1.3	CPLEX
qiu	17411	11278	266.4	176.9
bienst1	11143	36069	56.0	821.7
bc1	27785	12385	836.6	532.5
eilD76	5943	56327	229.8	286.4
neos2	29262	75315	211.9	206.0
aflow_40	51511	118249	717.6	877.2
gesa2_o	67491	956	201.8	2.4
prod1	73995	204533	88.1	182.2
rout	30664	189456	80.0	945.0
ran13x13	98340	80516	94.2	119.3
ran10x26	50408	22446	65.3	58.5
bienst2	118679	> 102976	517.1	> 3600.0
ran12x21	119264	138040	155.8	333.0
misc07	46206	83976	107.0	111.9
aflow_30	95128	296282	341.5	1128.9
neos7	241365	255406	1025.2	1013.1
pk1	298680	540744	104.7	185.4
neos3	368354	> 674439	3361.3	> 3600.0
mas76	531091	560280	191.4	153.9
mas74	3920036	6526623	1632.7	2941.9
Summe (20)	6202756	9986296	10284.5	17276.3
Geom. Mittel	80358.6	103624.7	254.2	343.9

Tabelle 2.1: Benötigte Branch-and-Bound-Knoten und Laufzeit in Sekunden von SIP 1.3, sowie von CPLEX 8.0 mit Standardparametern. Die Probleme “bienst2” und “neos3” konnten von CPLEX 8.0 nicht in der vorgegebenen Zeit von 3600 Sekunden gelöst werden.

In Tabelle 2.1 sind die Ergebnisse auf einigen Instanzen der MIPLIB 3.0 [2] sowie der Problembibliothek von Hans Mittelmann [8] aufgeführt. Es werden die Anzahl der benötigten Branch-and-Bound-Knoten sowie die Laufzeit in Sekunden verglichen. SIP 1.3 ist die Version nach den Modifikationen in 2002. Als Vergleich sind die Ergebnisse von CPLEX 8.0 mit Standard-Parametereinstellungen angegeben. Die Rechnungen wurden auf einem Pentium-4 (2,53 Ghz) mit 2 Gigabyte Hauptspeicher durchgeführt.

## Modierungssprache Zimpl

**Bearbeitet von:** Thorsten Koch

Zimpl ist eine Programmiersprache, um das mathematische Modell eines Problems 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 [6] geschrieben und kann dann von gängigen LP-Lösern wie z. B. SoPlex (siehe Abschnitt 6.7) und MIP-Lösern wie z. B. SIP (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; minimize cost: 2 * x + 3 * y; subto c0: x + y &lt;= 6;</pre>
---	---

Man erhält dann die zugehörige MPS Datei:

```
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 mehreren Projekten und zwei Vorlesungen erfolgreich eingesetzt. Das Programm wird derzeit entsprechend den Anforderungen in den Projekten weiterentwickelt. So konnten Sprachumfang und Geschwindigkeit kontinuierlich gesteigert werden. Weitere Entwicklungen wie die Verwendung von rationaler Arithmetik und integriertem Preprocessing sind geplant.

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



## Kombinatorische Relaxierungen

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer

Dieses Projekt befaßt sich mit der Untersuchung gewisser Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme, die durch eine polyedrische Einbettung des betrachteten Problems in ein anderes kombinatorisches Optimierungsproblem entstehen. Solche “kombinatorischen Relaxierungen” erlauben eine Übertragung von Ungleichungen und zugehörigen Separierungsverfahren vom Einbettungsproblem auf das ursprüngliche Problem.

Die meisten unserer bisherigen Ergebnisse beziehen sich auf die Konstruktion von Stabile-Mengen-Relaxierungen. So lassen sich etwa viele Typen von Ungleichungen, in denen kreisförmige Strukturen eine Rolle spielen (z. B. die Möbius-Leiter-Ungleichungen für das Azyklische-Subdigrahen-Problem), als “expandierte” Ungerade-Kreis-Ungleichungen einer passenden Stabile-Mengen-Relaxierung erklären und meistens auch in polynomialer Zeit separieren. Auf ähnliche Weise kann man auch vollständige Beschreibungen gewinnen, etwa für das allgemeine Problem des “Packens zweier kombinatorischer Strukturen”.

Im Berichtszeitraum haben wir an Untersuchungen zur Ausdehnung dieser Ergebnisse auf andere Klassen von ganzzahligen Programmen gearbeitet. Für solche Probleme sind nur wenige allgemeine Klassen von polynomial separierbaren Ungleichungen bekannt. Wir erhoffen uns von unseren Arbeiten Fortschritte bei der Bestimmung von unteren Schranken.

Kombinatorische Relaxierungen werden in [3, 4, 5] behandelt.

## SteinLib Testdata Library

**Bearbeitet von:** Thorsten Koch

**Kooperationspartner:** Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt), Stefan Voß (Technische Universität Braunschweig, ab 01.10.2002 Universität Hamburg)

Das Steinerbaumproblem in Graphen läßt sich wie folgt formulieren: In einem Graphen  $G = (V, E, c)$  mit einer Knotenmenge  $V$ , einer Kantenmenge  $E$  und Kantengewichten  $c_e$  sowie einer Menge  $T \subseteq V$  von ausgezeichneten Terminals wird ein  $T$  aufspannender Subgraph von  $G$  minimalen Gewichts gesucht. Hierbei sind auch Varianten möglich, z. B. das Steinerarboreszenzproblem, bei dem in einem gerichteten Graphen  $G = (V, A, c)$  eine  $T$  aufspannende Arboreszenz mit Wurzel  $r \in T$  gesucht wird, oder das Gruppensteinerbaumproblem, bei dem disjunkte Mengen  $T_i \subseteq V$  gegeben sind: die Lösung ist dann ein aufspannender Baum in  $G$ , der mindestens einen Knoten aus jedem  $T_i$  enthält. Weitere Varianten sind Steinerbaumprobleme mit Längenbeschränkungen oder das kostensammelnde Steinerbaumproblem. Das Steinerbaumproblem in Graphen ist wie die meisten seiner Varianten (insbesondere alle hier genannten) NP-schwer.

Die von uns eingerichtete abrufbare Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen

wird beständig aktualisiert und erweitert.

Es hat sich gezeigt, daß, wie erhofft, eine zunehmende Zahl von Veröffentlichungen darauf Bezug nimmt.

### Publikationen

- [1] T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *Branching on History Information*, Report 02-32, ZIB, 2002.
- [2] R. E. Bixby, S. Ceria, C. McZeal und M. W. P. Savelsbergh. *An updated mixed integer programming library: MIPLIB 3.0*, <http://www.caam.rice.edu/~bixby/miplib/miplib.html>, 1998.
- [3] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998. Shaker Verlag, Aachen, 1998.
- [4] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Set Packing Relaxations of Some Integer Programs*, *Mathematical Programming* **88** (2000), 425–450.
- [5] R. Borndörfer und R. Weismantel, *Discrete Relaxations of Combinatorial Programs*, *Discrete Applied Mathematics* **112** (2001), Nr. 1–3, 11–26.
- [6] ILOG CPLEX Division, 889 Alder Avenue, Suite 200, Incline Village, NV 89451, USA. *ILOG CPLEX 8.0 Reference Manual*, <http://www.cplex.com>, 2002.
- [7] A. Martin, *Integer Programs with Block Structure*, Habilitationsschrift, TU-Berlin, 1998.
- [8] Hans Mittelmann. *Decision tree for optimization software: Benchmarks for optimization software*, <http://plato.asu.edu/bench.html>.

### 2.2.11 Online-Optimierung

Im Gegensatz zur klassischen Optimierung geht man in der *Online-Optimierung* davon aus, daß nicht sämtliche Daten eines Problems vorab bekannt sind. Somit müssen Entscheidungen auf der Basis unvollständigen Wissens getroffen werden. Die Eingabe wird als eine (endliche) *Anfragefolge*  $\sigma = r_1, r_2, \dots$  modelliert, die einem Online-Algorithmus stückweise offenbart wird. 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. Die Entscheidungen des Online-Algorithmus sind je nach Problem zusätzlichen Einschränkungen unterworfen. Eine wichtige Rolle in der Entwicklung von praxistauglichen Online-Algorithmen sind *Echtzeit-Anforderungen*: der Algorithmus muß innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern.

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich in den letzten Jahren die von Sleator und Tarjan [17] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [3, 5]). Der Zielfunktionswert einer vom Online-Algorithmus generierten Lösung wird mit dem Wert einer optimalen Offline-Lösung verglichen. Ein Algorithmus heißt *c-kompetitiv*, wenn für jede Eingabe seine “Kosten” höchstens  $c$ -mal so groß wie die des optimalen Offline-Algorithmus sind. Die kompetitive Analyse bringt jedoch einige Nachteile mit sich. Die Modifikation und Erweiterung der kompetitiven Analyse und die Entwicklung geeigneter anderer Bewertungskriterien ist ein aktuelles Forschungsthema in der Online-Optimierung.

Eine wichtiges Anwendungsgebiet der Online-Optimierung sind Planungsprobleme im Transportwesen und der innerbetrieblichen Logistik. 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 treten auch bei der Planung von Einsatzfahrzeugen auf, wie 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 spielt der Online-Aspekt ebenfalls eine wichtige Rolle. Hier ergeben sich Anwendungen beim Routing von neuen Verbindungsanfragen und bei der Rekonfiguration des Netzes nach Ausfallsituationen. Für die Berechnung einer neuen Netzkonfiguration steht nur eine sehr kurze Zeitspanne zur Verfügung, so daß auch hier die Echtzeitanforderung greift.

### **Kombinatorische Online-Planung**

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

**Förderung:** DFG-Forschergruppe “Algorithmen, Struktur, Zufall”

Die Standardmethode der Online-Optimierung, die kompetitive Analyse, ist sehr pessimistisch. Oft ist ein optimaler Offline-Algorithmus derart durch seine vollständige Information bevorteilt, daß nur nahezu triviale Kompetitivitätsaussagen beweisbar sind (vgl. *triviality barrier* in [5]). 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 Betrachtung zufälliger Eingabesequenzen gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung kann Ergebnisse liefern, die für “typische” Eingaben aussagekräftig sind (*Average-Case-Analyse*).

Wir möchten in diesem Projekt für Online-Planungsprobleme im Zeitstempelmodell (z. B. für Online-Transportprobleme) Modifikationen der kompetitiven Analyse und gänzlich neue Konzepte entwickeln, die es erlauben, die Güte von Online-Algorithmen

einerseits zu verbessern und andererseits praxisrelevanter beurteilen zu können, als es mit klassischer kompetitiver Analyse derzeit möglich ist. Dabei liegen die Schwerpunkte auf randomisierten Algorithmen, *Average-Case-Analyse* und der Untersuchung praktisch sinnvoller Anfragesequenzen durch mathematische Beschreibung von Restriktionen.

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 *Traveling-Salesman-Probleme* können auf das OLDARP zurückgeführt werden (siehe z. B. [1, 15]). Für randomisierte Algorithmen für das OLDARP konnten wir im letzten Jahr neue Techniken entwickeln, um untere Schranken für deren Güte zu gewinnen [13].

Mit Hilfe von spieltheoretischen Methoden und Hilfsmitteln der (kontinuierlichen) Optimierung gelang es, die bisher bekannten Schranken für die Minimierung der Summe der Fertigstellungszeiten im OLDARP zu verbessern. Für die Minimierung der maximalen oder durchschnittlichen Flußzeit existieren für das OLDARP nachweislich keine kompetitiven Algorithmen – weder deterministisch noch randomisiert. In [9] wurden Alternativen zur kompetitiven Analyse behandelt. Wir konnten im letzten Jahr zeigen, daß unter einer natürlichen Einschränkung der Macht des Offline-Gegenspielers ein Algorithmus mit konstanter Kompetitivität (relativ zum eingeschränkten Gegner) für einen Spezialfall des OLDARP existiert [12]. Die Restriktion des Gegenspielers liegt darin, daß er sich nur dann in eine Richtung bewegen darf, wenn dort auch unbearbeitete Aufträge zu finden sind. Das Ergebnis in [12] ist das erste positive Resultat zu einem (*Worst-Case-*) kompetitiven Algorithmus für das OLDARP.

Als erster Schritt auf dem Weg zu einer *Average-Case-Analyse* von Online-Algorithmen für das OLDARP wurden im letzten Jahr wichtige Ergebnisse für das zugeordnete Offline-Problem DARP erzielt. Die Offline-Variante ist bereits auf einfachen Graphklassen wie Tausendfüßlergraphen NP-schwer [10]. Die genannte Graphklasse ist vor allem für die Modellierung von Aufzugssystemen wichtig. Es gelang uns, einen Algorithmus anzugeben, der bei probabilistischer Eingabe das Problem mit hoher Wahrscheinlichkeit in Polynomialzeit löst [4], obwohl das DARP NP-schwer ist.

### **Modellierung, Analyse und Simulation von modularen Echtzeit-Systemen**

**Bearbeitet von:** Sven O. Krumke, Tjark Vredeveld

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”

Zahlreiche Optimierungsprobleme besitzen eine modulare Struktur und lassen sich in kleinere Teilprobleme zerlegen. Beispielsweise sind innerbetriebliche Logistiksysteme aus einzelnen Komponenten wie Hochregallagern, Aufzügen usw. zusammengesetzt. Zwar sind bisher erfolgreich Algorithmen und analytische Methoden für die Evaluierung von einzelnen Komponenten entwickelt worden, leider ist jedoch wenig über die Wechselwirkung von heterogenen Komponenten in komplexen Systemen bekannt.

Das Ziel des Projekts ist es, vorhandene modulare Strukturen auszunutzen, um neue

Gütegarantien für komplexe Online-Algorithmen zu gewinnen. Eine zentrale Fragestellung ist dabei, ob und wie sich Gütegarantien für die einzelnen Module auf das Gesamtsystem übertragen lassen. Im Fokus der Forschung stehen kombinatorische Optimierungsprobleme aus dem Transport- und Logistikbereich.

Auf der theoretischen Seite sollen im Rahmen des Projekts Erweiterungen und Alternativen zur kompetitiven Analyse entwickelt werden, die modulare Strukturen zulassen. Ergänzend dazu sollen durch Simulation wichtige Entscheidungshilfen für die Praxis gewonnen werden.

### **Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung**

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Jörg Rambau

**Kooperationspartner:** eCom Logistik (Berlin), Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e. V. (ADAC, München), T-Systems Nova (Berlin)

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”

Viele logistische Systeme in der Produktionsplanung erfordern eine verlässliche Online-Steuerung. Eine spezielle Klasse von Online-Algorithmen wird in diesem Projekt anhand von Beispielproblemen aus der innerbetrieblichen Logistik untersucht: die *Reoptimierungsalgorithmen*. Bei jeder Änderung des Systemzustands wird ein Offline-Optimierungsproblem (im folgenden kurz *Hilfsproblem*) mit den zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Daten gelöst. Diese Lösung wird dann bis zur nächsten Änderung des Systemzustands zur Steuerung verwendet. Das verwendete Hilfsproblem kann zum Beispiel die Offline-Version des Original-Online-Optimierungsproblems sein (*Standard-Hilfsproblem*): man optimiert unter den gleichen Nebenbedingungen dieselbe Zielfunktion wie im Online-Problem, benutzt aber nur die jeweils verfügbaren Input-Daten. Dieses kann zu unerwünschten Ergebnissen führen [9].

Ziel dieses Projektes ist, wie man zu einem Online-Optimierungsproblem besser geeignete Hilfsprobleme entwerfen kann, z. B. um stabileres Online-Verhalten zu erzeugen. Wir vermuten, daß Hilfsprobleme mit geringer Sensitivität geeignet sind.

Zum Projektstart Mitte 2002 haben wir mit dem Steuerungsproblem eines Paletten-Fahrstuhlsystems mit mehreren Fahrstühlen begonnen. Bislang werden bei solchen Steuerungen die Zuordnung der Aufträge auf Fahrstühle und die Reihenfolgeplanung der einzelnen Fahrstühle in der Regel separiert behandelt. Zunächst konnten wir experimentell nachweisen, daß ein integrierter Optimierungsalgorithmus auf Basis von dynamischer Spaltengenerierung für das Standard-Hilfsproblem und Varianten prinzipiell echtzeitauglich ist (fast-optimale Lösungen können in wenigen Sekunden geliefert werden). Als nächster Schritt soll dieser Algorithmus als Modul in unsere Simulationsumgebung für Fahrstuhlsteuerungen eingepaßt werden, damit wir das Verhalten der Online-Steuerung auf Basis verschiedener Hilfsprobleme experimentell untersuchen können.

### Online-Disposition von Fahrzeugen

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

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

Das Ziel dieses Projektes ist es, ein Online-Dispatching-Verfahren zu entwickeln, das bei der Berechnung einer *Echzeit*-Einsatzplanung für die Pannenhilfsfahrzeuge vom ADAC verwendet werden kann. Der ADAC verfügt über eine heterogene Flotte von mehr als 1.600 Fahrzeugen, deren geographische Position jederzeit mit Hilfe von GPS genau lokalisiert werden kann. In fünf über Deutschland verteilten regionalen Hilfszentralen werden Pannemeldungen angenommen und über die Disposition der Einsatzmittel (sowohl der ADAC-Flotte als auch externer Servicepartner) entschieden.

Dafür unterstützt das vorhandene *PANDA*-Computer-System den Disponenten mit Informationen über Position und Status der aktuellen Aufträge und der ADAC-Fahrzeuge. Ausgehend von diesen Informationen 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 schwierig, einerseits, weil die Berechnung eines solchen Einsatzplans mit global guter Qualität aus mathematischer Hinsicht ein komplexes Problem darstellt, andererseits, weil diese Berechnung in *Echzeit* erfolgen muß, d. h. der Disponent hat nur wenig Zeit zum Entscheiden. Ferner besitzt das Problem *Online-Charakter*: Entscheidungen müssen ohne Kenntnis zukünftiger Pannemeldungen getroffen werden. Erweist sich eine Entscheidung später als ungünstig, so kann sie nur in begrenztem Maße revidiert werden.

Die Forschungsarbeit 2002 bestand hauptsächlich in der Suche nach geeigneten Online-Strategien für die Einbettung des *Offline Vehicle Dispatching*-Moduls in ein Online-Dispatching-Verfahren. Mit gespeicherten Daten aus verschiedenen Hilfszentralen haben wir Simulationen durchgeführt, in denen wir unterschiedliche Ansätze nach der Qualität der gelieferten Lösungen evaluiert haben. Für die vorhandenen Instanzen wurden die besten Ergebnisse bei der sog. **Sofort-REPLAN** Strategie erzielt. Diese Strategie besteht darin, den gesamten Einsatzplan bei jedem Bekanntwerden eines neuen Auftrages neu zu berechnen. Betrachtet man den Planungsprozeß über einem Zeithorizont von zwei Stunden, so liegen die Kosten der vom **Sofort-REPLAN** berechneten Lösung im Durchschnitt etwa um 50% über dem Offline-Optimum, d. h. über den Kosten der bestmöglichen Planung, die man erstellen könnte, wenn man alle in diesen zwei Stunden vorkommenden Aufträge im Voraus kennen würde. Im Vergleich zu anderen Online-Problemen liegt dieser Wert in einem akzeptablen Bereich. Weitere Schlußfolgerungen der Analyse sind in [8] zu finden. Wie auch das Offline-Dispatching Modul wurde das Online-System von IPS implementiert. Seit November 2002 läuft es im Pilotbetrieb bei der Hilfszentrale-Ost des ADAC.

Bei der Auswertung der ersten praktischen Ergebnisse im Systemeinsatz zeigte sich ein neues Problem. Unter Umständen können die Lösungen von aufeinanderfolgen-

den Offline-Instanzen stark voneinander abweichen. Dieses in der Optimierung nicht selten auftretende Verhalten kann in unserem Fall unerwünschte Nebenwirkungen mit sich bringen, wenn z. B. der nächste Auftrag für ein bestimmtes Hilfsfahrzeug ständig gewechselt wird – ein Phänomen, das in der Online-Optimierung als *Preemption* bezeichnet wird. Zur Zeit untersuchen wir mithilfe weiterer umfangreicher Simulationen, wie diese *Preempts* im Laufe eines Tages verteilt sind, welche Ursachen ihr Auftreten hat und welche Gegenmaßnahmen vernünftig sind. Es ist im Moment z. B. nicht klar, welches Optimierungspotential verschenkt wird, wenn man überhaupt keine *Preempts* erlaubt.

### **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)

In zukünftigen optischen Kommunikationsnetzwerken werden Signale nicht nur in optischer Form über einzelne Glasfasern gesandt, sondern an den Zwischenknoten auch optisch verschaltet. Sie behalten somit die anfangs gewählte Wellenlänge auf ihrem gesamten Weg zwischen Start- und Zielknoten bei. Solche optischen Netze werden daher durch einen Graphen zusammen mit einer Menge von Wellenlängen modelliert. Dabei wird für jede Kante des Graphen angegeben, welche Teilmenge aller Wellenlängen darauf zur Verfügung stehen. Eine Verbindung in einem optischen Netz wird durch einen *Lichtweg* abgebildet, wobei ein Lichtweg definiert ist als ein Weg in dem Graphen zusammen mit einer Wellenlänge, die auf allen Kanten des Weges verfügbar sein muß. Die *Wellenlängenkonfliktbedingung* stellt dabei sicher, daß jede Wellenlänge auf einer Kante nur von höchstens einem Lichtweg benutzt wird.

Bei der dynamischen Konfiguration optischer Kommunikationsnetze treffen Verbindungsanfragen im Zeitverlauf ein. Eine Verbindungsanfrage, auch *Call* genannt, gibt dabei einen Start- und einen Zielknoten sowie die Anzahl der dazwischen benötigten Lichtwege an. Ein Algorithmus muß für jede neu eintreffende Anfrage sofort entscheiden, ob sie angenommen oder abgelehnt wird. Wird die Anfrage angenommen, so muß der Algorithmus die erforderliche Anzahl an Lichtwegen zwischen dem angegebenen Knotenpaar zur Verfügung stellen. Hierbei dürfen bestehende Lichtwege nicht geändert oder gelöscht werden, und es muß die Wellenlängenkonfliktbedingung eingehalten werden. Der Online-Charakter des Problems zeigt sich darin, daß der Algorithmus keinerlei Informationen über zukünftige Anfragen besitzt, wenn er seine Entscheidung über den aktuellen *Call* treffen muß.

Das Ziel des Projektes ist das Design, die Implementierung und die Bewertung von Algorithmen für die dynamische Konfiguration optischer Netze. Im Berichtszeitraum lag der Fokus dabei auf der Weiterentwicklung und der Bewertung verschiedener Algorithmen. Zu diesem Zweck wurde die bisher erstellte Simulationssoftware erheblich erweitert. Ausführliche Simulationsexperimente zeigten, daß der beste der bekann-

ten *Greedy*-Algorithmen vergleichbar gute Resultate erzielt wie der anspruchsvollste der neu entwickelten Algorithmen, welcher als Unterprogramm mehrere *Mehrgüterflußprobleme* löst (siehe [11]). Dabei waren die zufällig erzeugten Anfragen in allen durchgeführten Experimenten jedoch sehr gleichmäßig verteilt.

Erfahrungen aus anderen Bereichen der kombinatorischen Optimierung haben gezeigt, daß *Greedy*-Algorithmen bei ungleichmäßig verteilten Eingabedaten schwächere Resultate erzielen. Wir vermuten daher, daß die neu entwickelten Algorithmen in realistischen Szenarien besser abschneiden.

Ein weiteres wichtiges Ergebnis der Simulationsstudie stellte sich beim Vergleich verschiedener *Greedy*-Algorithmen untereinander heraus: die *Tie-breaking*-Regeln haben erheblichen Einfluß auf das Ergebnis. Bei einem realistischen Schwellwert für die Blockierungswahrscheinlichkeit, d. h. das Verhältnis aus abgelehnten und erzeugten Anfragen, konnte bei richtiger Auswahl der *Tie-breaking*-Regel eine bis zu dreifache Verkehrslast im Netz untergebracht werden.

Das Projekt wurde Ende August abgeschlossen.

### Publikationen

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.
- [4] A. Coja-Oglan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *Scheduling a server on a caterpillar network - a probabilistic analysis*, Proceedings of the 6th Workshop on Models and Algorithms for Planning and Scheduling Problems, 2003.
- [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] M. Grötschel, D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *Simulation Studies for the Online Dial-a-Ride Problem*, Report 99-09, ZIB, 1999, erweiterte Zusammenfassung zur Präsentation angenommen bei Odysseus 2000, first workshop on freight transportation and logistics, Kreta, 2000.
- [7] M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, *Online optimization of complex transportation systems*, Online Optimization of Large Scale Systems (M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau, Hrsg.), Springer, 2001, 705–730.



- [8] M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Online-dispatching of automobile service units*, Operations Research Proceedings (U. Leopold-Wildburger, F. Rendl und G. Wäscher, Hrsg.), Springer, 2002, 168–173.
- [9] 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, lange Version erscheint in: Theoretical Computer Science, 137–149.
- [10] D. Hauptmeier, S. O. Krumke, J. Rambau und H.-C. Wirth, *Euler is standing in line*, Discrete Applied Mathematics **113** (2001), 87–107.
- [11] R. Hülsermann, M. Jäger, D. Poensgen, S. O. Krumke, J. Rambau und A. Tuchscherer, *Dynamic routing algorithms in transparent optical networks*, Proceedings of the 7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling, Bd. 1, 392–312, erscheint auch in Kluwer Academic Press, 2003.
- [12] S. O. Krumke, L. Laura, M. Lipmann, A. Marchetti-Spaccamela, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *Non-abusiveness helps: An  $O(1)$ -competitive algorithm for minimizing the maximum flow time in the online traveling salesman problem*, Proceedings of the 5th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2462, Springer, 2002, 200–214.
- [13] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *News from the online traveling repairman*, Theoretical Computer Science (2003).
- [14] S. O. Krumke und D. Poensgen, *Online call admission in optical networks with larger demands*, Proceedings of the 28th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Bd. 2573, Springer, 2002.
- [15] S. O. Krumke und J. Rambau, *Online Optimierung*, Report 00-55, ZIB, 2000.
- [16] S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Realtime-dispatching of guided and unguided automobile service units with soft time windows*, Algorithms – ESA 2002, 10th Annual European Symposium, Rom, Italien, 17–21. September, 2002, Proceedings (R. H. Möhring und R. Raman, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2461, Springer, 2002, 637–648.
- [17] 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

Der Bereich des öffentlichen Verkehrs bietet viele Möglichkeiten zur Anwendung von Optimierungsverfahren. In der operativen Planung haben wir in der Vergangenheit in

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 in den betrieblichen Einsatz gebracht. Insbesondere die Module VS-OPT und DS-OPT zur Umlauf- bzw. Dienstplanoptimierung werden in vielen Verkehrsbetrieben im In- und Ausland verwendet. Dazu gehören z.B. Connex Deutschland, DB Regio und Norgesbus.

In den aktuellen Projekten *Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben* und *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* werden diese Methoden weiterentwickelt und neue Aspekte hinzugefügt. Im Projekt *Management verteilter Lager* wird ein Planungsproblem mit stochastischen Einflüssen untersucht.

Zum ersten Mal haben wir in dieser Berichtsperiode Projekte zur strategische. Planung bearbeitet. Dies sind im Einzelnen das Projekt *Strategische Planung im Nahverkehr* im Rahmen des DFG-Forschungszentrums, welches sich mit dem Entwurf von optimierten Nahverkehrsnetzen befasst, und das Projekt *Trassenbörse*, in welchem die Planung des Schienenverkehrs für konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen untersucht wird.

### **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 wurde eine Optimierungsstudie zur Dienstplanung bei den Berliner Verkehrsbetrieben (BVG) durchgeführt. Die Hauptziele waren die Nutzbarmachung des ZIB Dienstplanungstools DS-OPT für den Planungsbetrieb der BVG, die Durchführung von Testrechnungen auf ausgewählten Szenarien, die Analyse möglicher Einsparpotentiale und die Erarbeitung von Empfehlungen zur Verbesserung des Planungsablaufs bei der BVG. Das Projekt wurde im Berichtszeitraum mit der Vorlage des Abschlußberichts abgeschlossen. Die Untersuchungen basieren auf unseren Arbeiten zur Entwicklung der Tools VS-OPT und DS-OPT zur Umlauf- und Dienstplanoptimierung in den BMB+F Förderprogrammen "Anwendungsorientierte Verbundprojekte auf dem Gebiet der Mathematik" und "Mathematische Verfahren zur Lösung von Problemstellungen in Industrie und Wirtschaft" und auf einer Vorgängerstudie zur Umlaufplanung bei der BVG.

Zur Nutzbarmachung von DS-OPT bei der BVG waren eine Reihe von algorithmischen Anpassungen und Erweiterungen notwendig, um betriebspezifische Besonderheiten behandeln zu können. Die Rechnungen wurden auf ausgewählten Szenarien für verschiedene Betriebshöfe des Betriebsbereichs Omnibus (BO) und für eine Reihe von Teilbereichen des Betriebsbereichs Straßenbahn (BS) durchgeführt. Das größte Szenario bei BO, ein Problem für den Betriebshof Lichtenberg, umfaßte 386 Dienste, das größte Problem bei BS, eine Instanz für den Bereich Nordost-Weißensee, 164 Dienste.

Die Optimierungsergebnisse wurden von BO und BS evaluiert und als produktions-tauglich eingestuft. Damit ist der Nachweis der Eignung von DS-OPT für die Planung bei der BVG erbracht.

Die Ergebnisse von DS-OPT sind in der Dienstzahl und im Dienstschnitt im Wesentlichen äquivalent zu denen der BVG. Wir haben daraufhin eine Analyse durchgeführt, in der wir zeigen konnten, warum unter den gegenwärtigen Bedingungen durch eine Optimierung der Dienstplanung *allein* keine Verbesserungen möglich sind und welche Änderungen am Regelwerk, vor allem bei der Behandlung von Pausen und anderen unproduktiven Dienstbestandteilen, notwendig sind. Während der Endphase des Projektes hat die BVG bereits mit der Umsetzung einiger dieser Empfehlungen begonnen. Im Zuge dieser Anpassungen konnten wir außerdem BS bei der Einführung von Neuregelungen helfen, die ohne DS-OPT nicht bewältigt werden konnten.

Die mathematischen Grundlagen von DS-OPT sowie verschiedene Anwendungsa-spekte sind in den Arbeiten [1, 2, 3, 5, 8, 10] behandelt.

### **Integrierte Umlauf- und Dienstplanung**

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Andreas Löbel, Steffen Weider

**Kooperationspartner:** IVU Traffic Technologies AG (Berlin), Mentz Datenverarbeitung GmbH (München), Regensburger Verkehrsbetriebe GmbH (Regensburg)

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

In der operativen Planung von Verkehrsbetrieben werden die wichtigen Teilschritte der Umlauf- und Dienstplanung i. a. sequentiell durchgeführt [9]. Diese Vorgehensweise ist aber vor allem für den Regionalverkehr wegen der geringeren Flexibilität bei der Dienstbildung ungeeignet.

In Abbildung 2.34 ist die Struktur einer typischen Probleminstanz zu sehen. Es gibt kürzere Fahrgastfahrten in der Nähe eines Zentrums und längere Fahrten, die das Zentrum mit der Peripherie verbinden. Diese Überlandfahrten führen bei ungünstig geplanten Umläufen zu Problemen, da Fahrer ihre gemäß Lenkzeitverordnung und Arbeitszeitgesetz vorgeschriebenen Pausen und maximalen Lenk- und Arbeitszeiten nicht mehr einhalten können.

Wir entwickeln in diesem Projekt ein Verfahren, um in solchen Fällen die Umlauf- und Dienstplanung integriert in einem Schritt vorzunehmen. Die Hauptschwierigkeit ist dabei die große Anzahl an Freiheitsgraden. Diese rühren daher, daß nicht nur alle potentiellen Leerfahrten, sondern auch alle mögliche Einsetz- und Aussetzwege und die Möglichkeiten zum Fahrzeug- und Linienwechsel der Fahrer Eingangsdaten der Planung sind. Deswegen haben wir in unserem Ansatz besonderen Wert darauf gelegt, den Lösungsraum nicht künstlich einzuschränken, und damit wieder Freiheitsgrade zu verlieren. Der Preis dafür besteht in einem Verzicht auf exakte Verfahren zugunsten von schnellen und weniger speicherintensiven LP-basierten Heuristiken. Wir benutzen z.B. das proximale Bündelverfahren nach Kiwiel [11] anstelle eines exakten LP-Lösers und Probing-Methoden anstelle eines exakten Branch-And-Bound-Algorithmus zum

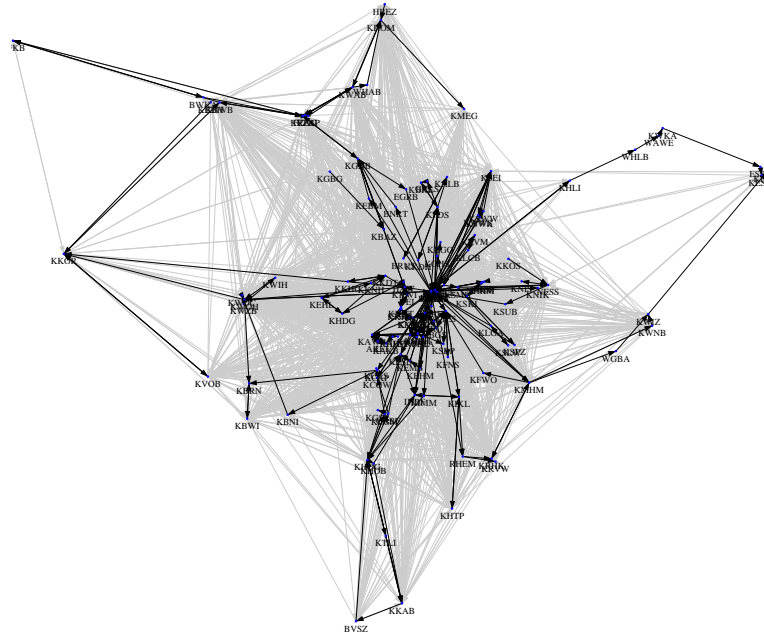


ABBILDUNG 2.34: Wege aus Fahrgastfahrten (schwarz) und potentielle Leerfahrten (grau) einer Probleminstanz der integrierten Umlauf- und Dienstplanung des Regionalverkehrsbetriebes Kurhessen (RKH)

Lösen der ganzzahligen Programme. Dieses Vorgehen hat sich bei den zwei vom BMB+F geförderten Vorgängerprojekten zur Umlauf- und zur Dienstplanoptimierung [12, 4] bewährt, auf denen dieses Projekt aufbaut.

Von unseren Projektpartnern haben wir Produktionsdaten verschiedener Regionalverkehrsbetriebe erhalten. In ersten Testläufen konnten wir Umlauf- und Dienstpläne für betriebshofweite Szenarien erstellen. Im Vergleich zur sequentiellen Planung deuten sich erhebliche Einsparpotentiale an. Methodik und Ergebnisse auf noch leicht vereinfachten Produktionsdaten sind in [6] veröffentlicht.

### Management verteilter Lager

**Bearbeitet von:** Stefan Röhl

**Kooperationspartner:** Christoph Helmberg (Technische Universität Chemnitz); eCom Logistik (Falkensee); Herlitz PBS AG (Berlin)

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Unternehmen, die aus historischen oder produktionstechnischen Gründen Lagerhäuser an mehreren 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 April 2001 vom BMBF innerhalb des Förderprogramms *Neue Mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung* unterstützt wird, das folgende Fallbeispiel. Unser Projektpartner, die eCom Logistik, betreibt Lagerhäuser an zwei verschiedenen Standorten (Falkensee, Tegel) und bietet als Dienstleistungen Kommissionierung und Versand von Waren an. Derzeit größter Kunde ist die Herlitz PBS AG, 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.

Als mathematisches Modell dienen uns 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. Umfangreiche Rechnungen, die zu Beginn des Berichtszeitraumes durchgeführt wurden, zeigen die Eignung dieses Ansatzes für die Lösung von Problemen dieser Größenordnung. Genutzt wurden dafür Offline-Daten, die noch für den Betrieb von drei Lagerstandorten vorlagen.

Die Arbeit im Berichtszeitraum wurde in starkem Ausmaß von den wirtschaftlichen Schwierigkeiten der Herlitz PBS AG geprägt. So konnte in der Mitte des Jahres 2002 zwar im Insolvenzverfahren die Insolvenz der Herlitz PBS AG abgewendet werden, in der Folge wurde jedoch ein dritter Lagerstandort geschlossen und es erfolgten erhebliche Umstrukturierungen im Unternehmen. Gleichzeitig erhöhte sich der Druck auf die eCom Logistik, die inzwischen wieder zu 100 % eine Tochter der Herlitz PBS AG ist, neue Kunden zu requirieren, da das Auftragsvolumen der Herlitz PBS AG deutlich zurückgegangen ist.

Die Firma eCom Logistik ist weiterhin sehr an der Fortführung des Projektes interessiert. So ist für die nähere Zukunft die erneute Einrichtung eines dritten Lagerstandortes vorgesehen, diesmal jedoch in größerer räumlicher Entfernung als bisher, so daß die Planung der LKW-Fahrten ein noch stärkeres Gewicht erhalten wird. Aus diesem Grund planen wir auch keine grundlegende Änderung unseres Modellierungsansatzes, da dieser Aspekt von uns im Gegensatz zu klassischen Modellen auf dem Gebiet der verteilten Lagerhaltung explizit berücksichtigt wird.

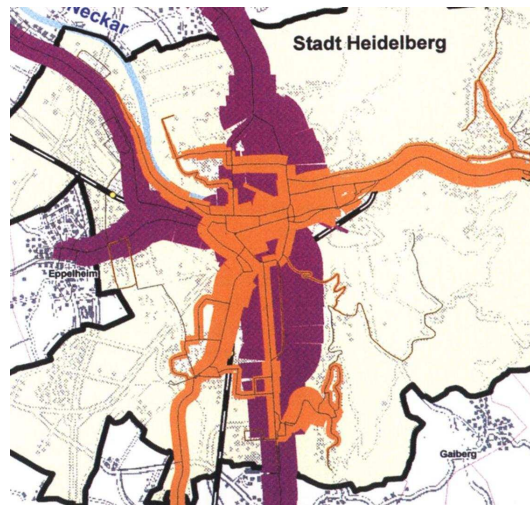


ABBILDUNG 2.35: Ausschnitt aus dem “Nahverkehrsplan Rhein-Neckar 1999–2003”: Werktägliche Streckenbelastung in Heidelberg, aufgeteilt in Busse und Straßenbahnen, 1996.

Im Berichtszeitraum wurde von uns ein Datenmodell entwickelt und mit der Firma eCom Logistik eine genaue Datenspezifikation für die zu übermittelnden Online-Daten festgelegt. Anschließend wurde durch uns ein Datenportal gemäß dieser Datenspezifikation implementiert, das bereits einem Großteil der Anforderungen des Datenmodells gerecht wird. Die Übermittlung der Auftragsdaten erfolgt seit Oktober 2002.

Eine wesentliche Frage für ein stochastisches Modell ist es, ob es auf der Basis der einzelnen Artikel oder bei der Summe der zu transportierenden Paletten ansetzen sollte. Bevor wir diese Frage angehen, wollen wir ausreichende Erfahrungen über das Verhalten der Lösungen für den deterministischen Fall sammeln. Dafür notwendige Lager- und Artikeldaten werden von unserem Kooperationspartner geliefert, sobald ihm das in der derzeitigen Situation möglich ist.

### Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Marc Pfetsch

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

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum “Mathematik für Schlüsseltechnologien”

In diesem Projekt sollen Anwendungsmöglichkeiten der kombinatorischen bzw. nicht-linearen Optimierung im Bereich der strategischen Planung im öffentlichen Nahverkehr untersucht werden. Das Ziel ist dabei die Optimierung von Nahverkehrsnetzen, siehe Abbildung 2.35. Im Gegensatz zur operativen Planung, zu der z. B. die Umlauf- und Dienstplanung gehören, sind in der strategischen Planung bislang wenig Optimierungsmethoden eingesetzt worden.

Unser Ansatz schlägt eine Unterteilung der strategischen Planung in die folgenden Teilprobleme vor: Netzdimensionierung, Linienplanung, Taktplanung, Anschlußplanung und Preisplanung.

Im Berichtszeitraum haben wir in Zusammenarbeit mit unseren Projektpartnern erste Modelle für diese Teilprobleme entwickelt. Die Spannbreite reicht dabei von kombinatorischen über stochastische bis zu nichtlinearen Modellen und von gegebener Nachfrage bis zur Steuerung derselben. Wir werden diese Modelle gemeinsam mit unseren Partnern weiterentwickeln und mit ersten Rechenexperimenten beginnen. Unser Ziel ist es dabei herauszufinden, in welchen Bereichen eine realistische Chance besteht, mit unseren Methoden einen Beitrag für die Planung des ÖPNV zu leisten. Ansätze ähnlich unserem für den Schienenverkehr werden in dem Artikel von Bussieck, Winter und Zimmermann [7] beschrieben.

### **Trassenbörse**

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer, Martin Grötschel und Sascha Lukac

**Kooperationspartner:** Institut für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik, Institut für Land- und Seeverkehr der TU Berlin, Unternehmensberatung Ilgmann+Miethner (Hamburg)

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Die Reform der Deutschen Bahn im Jahre 1994 gab Anlaß zu vielen Überlegungen, wie der Bahnverkehr verbessert werden könnte. Ein wichtiger möglicher Ansatz ist die Trennung von Rad und Schiene. Eine solche institutionelle Trennung von Netz und Betrieb erfordert eine Regelung der diskriminierungsfreien und ökonomisch effizienten Zuteilung von Zugtrassen an konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen. Die Machbarkeit solch eines Verfahrens wird durch die an dem interdisziplinären Projekt *Trassenbörse* beteiligten Ökonomen, Schienenfachleute und Mathematiker untersucht.

Wir haben im Berichtszeitraum mit der Entwicklung eines Modells begonnen, das auf einer Iteration von Auktionsschritten und Fahrplangenerierungen beruht. Die Hauptschwierigkeiten bestehen dabei in der Behandlung komplexer Abhängigkeiten zwischen einzelnen Zügen im Bahnnetz, in der großen Dimension der Planungsaufgabe und in der Behandlung der Monopolstellung eines dominierenden Anbieters.

Eine wichtige Unteraufgabe in einer Trassenbörse ist die konfliktfreie Allokation einer Menge von Trassen mit maximalem Wert. Wir haben dazu ein kombinatorisches Modell entwickelt. Ein erster Prototyp erlaubt die Durchführung von Auktionsspielen, wie sie in der Ökonomie üblich sind.

### **Publikationen**

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Optimization of Transportation Systems*, Report 98-09, ZIB, 1998.
- [2] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Duty Scheduling in Public Transit*,

- Report 01-02, ZIB, 2001.
- [3] 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, Tech. Report 463, Schriftenreihe des Fachbereichs Mathematik der Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, 2000, 30–34.
- [4] R. Borndörfer und A. Löbel, *Scheduling duties by adaptive column generation*, Report 01-02, ZIB, 2001.
- [5] R. Borndörfer, A. Löbel, U. Strubbe und M. Völker, *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*, in Heureka '99: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln, 1999, 171–194.
- [6] R. Borndörfer, A. Löbel und S. Weider, *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Nahverkehr*, Heureka '02: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (2002), 77 – 98.
- [7] M. R. Bussieck, T. Winter und U. T. Zimmermann, *Discrete optimization in public rail transport*, Mathematical Programming **79B** (1997), Nr. 1–3, 415–444.
- [8] C.-Y. Byun, *Lower Bounds for Large-Scale Set Partitioning Problems*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2001.
- [9] M. Kolonko und W. Fengler, *Entwicklung von Fahrplänen unter mehrfacher Zielsetzung*, Der Nahverkehr **11** (1997), 45 – 48.
- [10] M. Kammler, *Optimierungsverfahren für Dienstpläne im ÖV*, Nahverkehrspraxis **7/8**, 2000, S. 22.
- [11] K. C. Kiwiel, *Proximity Control in Bundle Methods for Convex Nondifferentiable Optimization*, Mathematical Programming **46** (1990), 105–122.
- [12] A. Löbel, *Solving Large-Scale Multiple-Depot Vehicle Scheduling Problems*, Proceedings of the 7th International Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport (1999), 195–222.

### 2.2.13 Grid Computing

In diesem Schwerpunkt arbeiten wir an der Entwicklung von Methoden zur effizienten Nutzung geographisch verteilter Ressourcen wie z.B. Rechenkapazität, Speicherplatz, Datenübertragungsleistung usw. Die Heterogenität der beteiligten Komponenten im Grid macht die Integration besonders schwierig, weshalb wir im GridLab-Projekt eine



autonome Dienstschicht eingeführt haben, mit der Anwendungen auf beliebigen Grid-Umgebungen ablaufen können. In dem im Berichtszeitraum angelaufenen FlowGrid-Projekt entwickeln wir eine Grid-Umgebung für CFD-Anwendungen, die im kommerziellen Bereich eingesetzt werden sollen.

Neben diesen konkreten Projekten fokussiert sich unsere Forschungsarbeit zunehmend auf den Aspekt des Datenmanagements in verteilten Systemen. Unterstellt man eine gewisse Unzuverlässigkeit (oder Nicht-Verfügbarkeit) der Knoten [6, 10], so müssen Replikate der Daten angelegt werden. In einem ersten Teilprojekt haben wir untersucht, wieviele Replikate unter welchen Bedingungen notwendig sind und in einem zweiten, wie diese untereinander synchronisiert werden können. Das Platzierungsproblem, d.h. an welchen Orten die Repliken am besten angelegt werden sollen, ist Inhalt unserer derzeitigen Forschungsarbeit.

### **GridLab - A Grid Application Toolkit and Testbed for a Grid Laboratory**

**Bearbeitet von:** Thorsten Schütt, Andrei Hatanu, Felix Hupfeld, André Merzky, Alexander Reinefeld, Simon Rieche (Stud.), Florian Schintke, Brygg Ullmer

**Kooperationspartner:** PSNC (Polen), AEI (Potsdam), Masaryk University (Tschechien), MTA SZTAKI (Ungarn), VU (Niederlande), ISUFI/HPCC (Italien), Cardiff University (United Kingdom), NTUA (Griechenland), University of Chicago (USA), Information Science Institute (USA), University of Wisconsin (USA), SUN Microsystems (USA), COMPAQ (Frankreich)

**Förderung:** Europäische Union

Um Anwendungsprogrammierern den Einstieg in das Grid Computing zu erleichtern, werden Tools benötigt, die ihnen bei der effizienten Einbettung ihrer komplexen Anwendungen in Grid-Umgebungen helfen. Im europäischen GridLab-Projekt ([www.gridlab.org](http://www.gridlab.org)) entwickeln wir eine universelle Middleware [5, 3], die als Zwischenschicht zwischen dem Anwendercode und existierenden Grid-Umgebungen dient. Unser Ziel ist es, daß die Middleware stellvertretend für die Anwendung entscheidet, auf welche Dienste in den jeweiligen Grid-Umgebungen zugegriffen wird. Dabei ist ein ganz wesentlicher Aspekt, daß diese Entscheidung vollständig autonom in der Middleware gefällt wird, damit die Anwendung ohne weitere Modifikation – ja, sogar ohne genaue Kenntnis der Laufzeitumgebung – an das gerade zur Verfügung stehende Grid-System angepaßt wird.

Das Funktionieren und die Effizienz der Gridlab-Middleware soll beispielhaft anhand zweier Anwendungen demonstriert werden: CACTUS, ein Code zur Simulation kollidierender Neutronensterne, sowie TRIANA, ein Analysewerkzeug zur Auswertung der im GEO-600-Experiment gesammelten Daten, die der empirischen Verifikation der Einsteinschen Raumzeitkrümmung dienen sollen. Die in Hannover gewonnenen GEO-600-Daten werden über eine Weitverkehrsverbindung täglich ans ZIB geliefert und im Archiv für die spätere Offline-Auswertung gespeichert. Beide Anwendungen dienen auch der Erprobung komplexer Szenarien, wie z.B. der Migration einer laufen-

den GridLab-Anwendung von einem Rechner auf den nächsten, ohne daß die Anwendung davon Kenntnis nehmen muß oder gar der Quellcode geändert werden müßte.

Im GridLab-Projekt leiten wir die Arbeitspakete "Data Handling and Visualization" [5, 3] und "Access for Mobile Users". Im Berichtsjahr haben wir einen Replika-Katalog und einen Data-Movement-Service entwickelt und implementiert. Darauf aufsetzend werden künftig Dienste zum Daten-Management mit einem höheren Abstraktionsgrad untersucht und implementiert. Im Bereich Mobile Computing haben wir untersucht, inwieweit dem Benutzer Zwischenergebnisse seiner Berechnungen graphisch auf PDAs (Personal Digital Assistants) und Handys dargestellt werden können. In Zukunft werden wir universelle Mechanismen entwickeln, um Grid-Jobs direkt vom PDA aus steuern zu können.

### **FlowGrid - Flow Simulations On-Demand Using Grid Computing**

**Bearbeitet von:** Jan Wendler, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

**Kooperationspartner:** University of Zaragoza (Spanien), CERTH/HIT (Griechenland), SKODA (Tschechien), HSVA (Hamburg), SYMBAN (United Kingdom)

**Förderung:** Europäische Union

Im europäischen FlowGrid-Projekt ([www.unizar.es/flowgrid](http://www.unizar.es/flowgrid)) soll eine virtuelle Organisation für die Durchführung von CFD-Simulationen (Computational Fluid Dynamics) etabliert werden, um damit eine gemeinsame Nutzung von Software, Computerressourcen und Wissen zu ermöglichen. Dazu wird mit Hilfe von Grid-Infrastruktur ein Netzwerk europäischer CFD-Zentren (Rechenzeitanbieter, Code-Eigentümer, Nutzer) eingerichtet. Vorbereitung, Ausführung und Überwachung der Simulationen sind sowohl räumlich als auch organisatorisch verteilt. Das FlowGrid-System soll für die Durchführung anspruchsvoller CFD-Simulationen in den Bereichen Schiffbau, Autoabgase, Verbrennung fossiler Brennstoffe, u.a. durch die Projektpartner eingesetzt werden.

In den ersten vier Monaten des Projektes (Gesamtlaufzeit: September 2002 bis August 2004) haben wir uns hauptsächlich der Analyse und dem Design der FlowGrid-Architektur gewidmet. Nach einer Untersuchung bereits vorhandener Middleware und einer Auswertung der Anforderungen an das System haben wir die Bestandteile des FlowGrid-Systems identifiziert und mit der Spezifikation und dem Design einer geeigneten Architektur begonnen. Dabei liegt unser Hauptanliegen in der Erforschung und Entwicklung von Grid-Umgebungen, die einen benutzerfreundlichen und effizienten Zugriff auf geographisch verteilte Ressourcen ermöglichen. Als Spezialfall soll auch die gleichzeitige Ausführung gekoppelter Anwendungen auf verschiedenen Systemen möglich sein. Mit den Ergebnissen dieses Projektes sollen Anwender – nicht nur im Bereich CFD – in die Lage versetzt werden, die modernen Techniken und Werkzeuge des Grid Computings ohne Spezialkenntnisse einsetzen zu können.

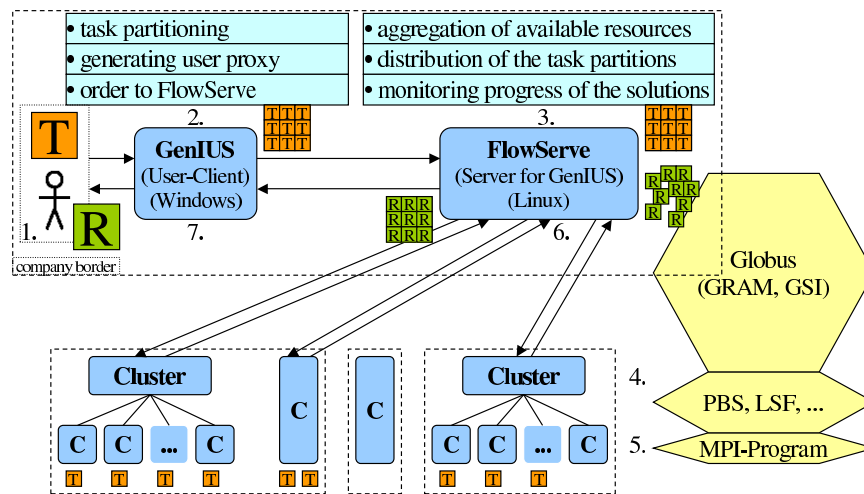


ABBILDUNG 2.36: FlowGrid System-Architektur

### UNICORE-PLUS - Uniformes Interface für Computer-Ressourcen

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben, Alexander Reinefeld, Philipp Rohwetter

**Kooperationspartner:** FZ Jülich (Koordinator), DWD Offenbach, LRZ München, PC<sup>2</sup> Paderborn, RUKA Karlsruhe, RUS Stuttgart, Fujitsu (United Kingdom)

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

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-PLUS 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-PLUS werden moderne Web-Techniken, wie z.B. https, signed applets und Zertifikate für sichere Kommunikation und Authentifizierung eingesetzt.

Um die Akzeptanz von UNICORE-PLUS – 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 usw.), 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 bräuhete 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 [2], mit dessen Hilfe sich der Endbenutzer die für seine spezifischen Bedürfnisse am besten geeigneten Eingabe-Masken (Forms) selbst entwickeln kann. 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.

Im Berichtszeitraum ist das GuiGen-Modul vollständig in die Softwareumgebung von UNICORE-PLUS integriert worden. Eine detaillierte Beschreibung von GuiGen ist im Journal “Future Generation Computing Systems” veröffentlicht.

## **Modellierung der Verfügbarkeit von Datei-Replikaten in großen Grid-Systemen**

**Bearbeitet von:** Florian Schintke, Alexander Reinefeld

Grid-Umgebungen werden derzeit hauptsächlich zur Verteilung von Rechenaufträgen auf geographisch verteilte Rechner genutzt, während Peer-to-Peer-Umgebungen, wie Tauschbörsen, eher beim Lagern und Austauschen von Daten eingesetzt werden. Erstere werden eher im wissenschaftlichen, letztere im privaten Umfeld genutzt. Ein Grund für die bisher geringe Akzeptanz von Peer-to-Peer-Speicherlösungen im wissenschaftlichen Kontext könnten die ungewisse Dateiverfügbarkeit, Datensicherheit bzw. Persistenz sein.

Um ein dem Peer-to-Peer-Ansatz folgendes System zu bauen, das vorgegebene Dateiverfügbarkeiten automatisch gewährleistet, wurden Modelle [4] entwickelt, die die Dateiverfügbarkeit in solchen Systemen beschreiben. Kernpunkt ist dabei der zweistufig ablaufende Prozeß des Dateizugriffs. Zunächst werden sogenannte Replika-Kataloge befragt, auf welchen Rechnern Kopien einer Datei abgelegt sind. Danach wird versucht, auf diese Kopie der Datei zuzugreifen. Die entwickelten Modelle berücksichtigen mehrere Architekturparameter, wie die Knotenzuverlässigkeit, die Katalogzuverlässigkeit, das Konsistenzmodell zwischen Katalogen und die Anzahl der Kataloge und Replikate im System, und liefert die Verfügbarkeit/Zuverlässigkeit einer Datei. Abbildung 2.37 zeigt die Zuverlässigkeit eines Peer-to-Peer-Modells mit einem bzw. drei Katalogen. Die Eintragswahrscheinlichkeit ( $p_{entry} = 0.4$ ) der Katalogeinträge beträgt 40% und die Verfügbarkeit der Daten und Kataloge ist als gleich angenommen.

Unterschieden wird zwischen einer lokalen und globalen Sichtweise auf das System. Während die lokale Sicht in ein sich selbst überwachendes System eingebaut werden

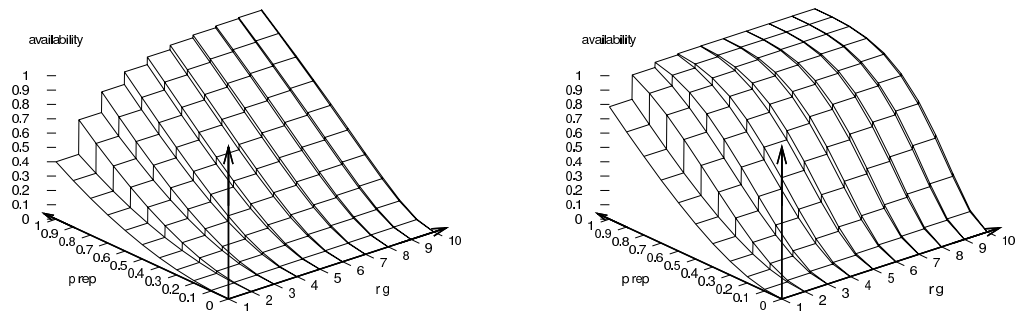


ABBILDUNG 2.37: Peer-to-Peer-Modell mit einem (links) bzw. drei Katalogen (rechts) und schwachem Konsistenzmodell

kann, um eine vorgegebene Mindestverfügbarkeit zu gewährleisten, dient die globale Sicht dem Systemadministrator, den Bedarf an Replikaten und somit die benötigte Speicherkapazität im Gesamtsystem abzuschätzen.

Die Modelle und ihre Einsatzmöglichkeiten sind detailliert in [3] beschrieben.

### StorageBox - Attributbasiertes Management von Informationen

**Bearbeitet von:** Felix Hupfeld

Persönliche Informationen wie Fotos, Mails, Briefe und Termine sind heute auf viele verschiedene Arten im Computer gespeichert und jeweils nur über spezielle Benutzerschnittstellen zugreifbar und verwaltbar. Das Dateisystem hält zwar die meisten der Daten, ist mit seiner hierarchischen Benennung aber sehr unflexibel, was sich schon an der einfachen Frage zeigt, ob man z.B. ein Foto des Brandenburger Tors in Berlin/Sehenswürdigkeiten oder besser in Sehenswürdigkeiten/Berlin ablegen soll. Andere Daten wie z.B. Emails und Termine sind in speziellen Datenbasen gespeichert und deshalb nur über das jeweilige Programm erreichbar. Diese inkonsistente Ablage macht es unmöglich, persönliche Informationen untereinander zu verknüpfen und auf sie über eine konsistente Benutzerschnittstelle zuzugreifen.

Eine Lösung dieses Problems verspricht die Benennung durch frei wählbare Attribut-Wert-Paare. Attribut-Wert-Paare sind einfach durch den Computer zu verarbeiten und auch für den Menschen leicht zu verstehen, bzw. kommen dessen Konzept zur Beschreibung von Dingen entgegen. Eine Schwachstelle dieses Ansatzes war bisher die Benutzerschnittstelle, die nur Suchen über explizites Formulieren von Abfragen zuließ.

Im StorageBox-Projekt [7] wird ein System zur attributbasierten Benennung und verteilten Speicherung von Information entwickelt, das sowohl für persönliche Informationen als auch für die Datenhaltung im Grid eingesetzt werden kann. Der Zugriff auf das System erfolgt über einen eigens entwickelten Desktop, der mit Hilfe eines Data-

Mining-Algorithmus zur Extraktion hierarchischer Strukturen aus dem Namensraum einen Zugriff auf die Daten erlaubt, der dem des vertrauten hierarchischen Dateisystems sehr ähnelt. Schwerpunkt unserer Arbeiten im Jahr 2002 war die Evaluierung des Data-Mining-Algorithmus und die Weiterentwicklung des Systems.

### **Effiziente Synchronisation von Datei-Replikaten in verteilten Systemen**

**Bearbeitet von:** Thorsten Schütt, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Das Management großer Datenmengen spielt eine immer wichtigere Rolle, wie aktuelle Entwicklungen z.B. in der Hochenergiephysik zeigen. Für das DataGrid-Projekt zum Beispiel ist es notwendig, große Datenmengen auf mehrere Rechenzentren in Europa zu verteilen und die Daten untereinander zu synchronisieren. Auch innerhalb von Clustern gewinnen mit zunehmender Knotenanzahl Werkzeuge zur effizienten Synchronisation und Verteilung von Daten an Bedeutung.

Im Rahmen dieses Projekts wurde ein effizientes Verfahren zur Synchronisation verteilter Verzeichnisstrukturen entwickelt und implementiert [9]. Mit diesem Verfahren ist es möglich, unabhängige Änderungen an beliebigen Repositories gleichzeitig durchzuführen. Das Verfahren benötigt keine zentrale Instanz, wodurch eine gegenüber vielen existierenden Verfahren verbesserte Skalierbarkeit erreicht werden konnte. Dabei wurden Erkenntnisse aus der Graphentheorie eingesetzt und weiterentwickelt, um die Netzwerktopologie und -bandbreiten zwischen den Rechnern zu berücksichtigen (Gossip). Durch die Verwendung einer Offline-Synchronisation werden Änderungen erst dann an andere Rechner verteilt, wenn der Nutzer dies anstößt. Das kann zum Beispiel nach einer abgeschlossenen Transaktion, die Änderungen an mehreren Dateien beinhaltet, angemessen sein.

Detailliert ist dieses Projekt in der Diplomarbeit von Thorsten Schütt [8] beschrieben.

### **Publikationen**

- [1] A. Reinefeld, F. Schintke, *Concepts and Technologies for a Worldwide Grid Infrastructure*, Euro-Par 2002 Parallel Processing, Aug. 2002, Springer LNCS 2400, pp 62-71.
- [2] A. Reinefeld, H. Stüben, F. Schintke, G. Din, *GuiGen: A Toolset for Creating Customized Interfaces for Grid User Communities*, Future Generation Computing Systems (FGCS), vol. 18, no. 8, Okt. 2002, pp. 1075-1084.
- [3] E. Seidel, G. Allen, A. Merzky, and J. Nabrzyski, *GridLab - A Grid Application Toolkit and TestBed*, Future Generation Computer Systems, vol. 18, pp. 1143-1153, Okt. 2002.
- [4] F. Schintke, A. Reinefeld, *On the Cost of Reliability in Large Data Grids*, Zuse-Institut Berlin, Report ZR-02-52, Dez. 2002. Accepted for publication in Journal of Grid Computing, Kluwer.

- [5] G. Allen, D. Angulo, T. Goodale, T. Kielmann, A. Merzky, J. Nabrzysky, J. Puckacki, M. Russell, T. Radke, E. Seidel, J. Shalf, and I. Taylor, *GridLab: Enabling Applications on the Grid*, Springer LNCS, vol. 2536, pp. 39-45, 2002.
- [6] A. Andrzejak, K. Fukuda, *Debugging Distributed Computations by Reverse Search*, AI2003, Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN'2003), Innsbruck, 10-13 Februar 2003.
- [7] F. Hupfeld, *Hierarchical Structures in Attribute-based Namespaces and their Application to Browsing*, ZIB Report 03-06.
- [8] T. Schütt, *Synchronisation von verteilten Verzeichnisstrukturen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2002.
- [9] T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld, *Efficient Synchronization of Replicated Data in Distributed Systems*, Intl. Conf. on Computational Science ICCS 2003, St. Petersburg, Juni 2003.
- [10] A. Andrzejak, *Memory-Efficient and Fast Enumeration of Global States*, 7th International Conference on Information Visualization, IV03-AGT, London, 16-18 Juli 2003.

### 2.2.14 Cluster Computing und Anwendungen

Dieser Schwerpunkt ist aus dem früheren Schwerpunkt "Cluster und Systemnetzwerke" hervorgegangen. Die Umbenennung soll die stärkere Fokussierung unserer Forschungsarbeiten auf Systemsoftware-Aspekte zum Ausdruck bringen. Nachdem wir in den vergangenen Jahren die Implementierung des STP-Protokolls auf dem Gigabit Ethernet-Netzwerk erfolgreich abgeschlossen haben, konnten wir uns im Jahr 2002 stärker dem Ressourcen-Management in Cluster-Systemen widmen. Ein wichtiges Ziel ist die Entwicklung von Methoden zur effizienten Nutzung von Clustern als Rechen- und Speicherknoten im Grid. Aus diesem Grund führen einige der hier aufgeführten Projekte den Begriff "Grid" im Titel, obwohl es sich doch eher um Cluster Computing-Projekte handelt.

Ein herausragendes Ereignis im Mai 2002 war die CCGrid2002, die wir zusammen mit Peter Löhr (FU Berlin) veranstaltet haben [1]. Das Akronym "CCGrid" steht für "IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid". Beide Aspekte, Cluster Computing und Grid Computing, waren auf dieser Konferenz gleichberechtigt vertreten. In einem sehr selektiven Begutachtungsprozeß durch den Programm Chair Henri Bal (Vrije Universiteit Amsterdam) und seinem Team, das aus 90 internationalen Gutachtern bestand, sind aus den 108 Einsendungen 27 wissenschaftliche Paper für einen Vortrag ausgewählt worden. Neben den sechs eingeladenen Hauptvorträgen hochkarätiger Sprecher aus Wissenschaft, Industrie und Ministerien gab es

eine Poster-Session, mehrere Life-Grid Demos, einige Industrievorträge sowie drei Tutorials. Aber nicht nur das attraktive Programm trug zum Erfolg der CCGrid2002 bei, sondern ganz sicher auch der Veranstaltungsort in der Mitte Berlins: Die Konferenz fand in den frisch renovierten, historischen Räumen der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften statt. Weitere Informationen zur CCGrid2002 finden sich unter <http://ccgrid2002.zib.de/>.

Unsere zukünftigen Forschungsarbeiten in dem Schwerpunkt *Cluster Computing und Anwendungen* werden zunehmend in den Bereich "Autonomic Computing" [6] übergehen. Vor dem Hintergrund immer komplexerer und immer umfangreicherer Cluster-Systeme kommt der automatischen Überwachung, Fehleranalyse und Fehlerbehebung eine große Bedeutung zu [5, 4]. Wie unten im Projekt DataGrid beschrieben, haben wir bereits Systemarchitekturen zur autonomen Softwarekonfiguration entwickelt.

Auf diesen Forschungsarbeiten aufsetzend dienen die parallelen Threading-Algorithmen, die in der BCB-Nachwuchsforschergruppe "Paralleles Alignment und Threading" entwickelt werden, als Demonstratoranwendungen zur Evaluierung unserer Managementkonzepte für HPC-Cluster. Die parallelen Threadingalgorithmen sind besonders kommunikationsintensiv, sowohl im Hinblick auf das zu bewegende Datenvolumen als auch auf die Kommunikationslatenzzeit.

### **DataGrid - Research and Technological Development for an International Data Grid**

**Bearbeitet von:** Thomas Röblitz, Janis Bardins, Jörg Meltzer, Karl Pauls, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

**Kooperationspartner:** CERN (Schweiz), PPARC (United Kingdom), INFN (Italien), CNRS (Frankreich), NIKHEF (Niederlande), ESA/ESRIN (Italien), IBM (United Kingdom), Compagnie des Signaux (Frankreich), Datamat (Italien), Helsinki Institute of Physics and CSC (Finnland), Swedish Natural Science Research Council (Schweden), Instituto Trentino di Cultura (Italien), KIP (Heidelberg), CEA/DAPNIA (Frankreich), IFAE (Barcelona, Spanien), CNR (Italien), CESNET (Tschechien), KNMI (Niederlande), SARA (Niederlande), SZTAKI (Ungarn)

**Förderung:** Europäische Union

Im DataGrid-Projekt ([www.eu-datagrid.org](http://www.eu-datagrid.org)) sind unter Federführung des CERN mehr als 170 Wissenschaftler aus 21 Institutionen beschäftigt. Ziel des Projektes ist es, für die nächste Generation von Kernteilchen-Experimenten auf dem Large Hadron Collider (LHC) die zur Datenauswertung erforderliche Rechnerinfrastruktur zu entwickeln und den Physikern zur Verfügung zu stellen. Die prognostizierte Datenmenge von mehreren Petabyte ( $10^{15}$  Byte) pro Jahr ist derart hoch, dass selbst die weltweit leistungsstärksten Supercomputer zur Auswertung der Daten nicht mehr ausreichen. Zur Lösung dieser internationalen Herausforderung werden einige tausend handelsübliche PCs zu Clustern verbunden und in sogenannten "Tier 1 Regionalzentren" für die Datenauswertung betrieben. Zusammen mit den Clustern der kleineren



“Tier 2 Zentren” werden ab dem Jahr 2005 weltweit insgesamt ca. 50.000 PCs für die Datenanalyse zur Verfügung stehen. Alle Regionalzentren sind über eine Grid-Software miteinander verbunden, so daß die Jobs der Physiker an beliebigen Orten gerechnet werden können [2].

Unsere Hauptaufgabe im DataGrid-Projekt liegt in der Integration der lokalen Clustersysteme in das Computational Grid. Im Berichtszeitraum haben wir eine Software für die effiziente Einbindung verschiedener Ressourcen-Managementsysteme entwickelt. In unserer Architektur steuert ein leistungsfähiger Scheduler (Maui-Scheduler) das Starten und Beenden von Benutzerjobs über eine neu entwickelte Integrations-Softwareschicht. Diese bietet den Vorteil, dass verschiedene Ressourcen-Managementsysteme leicht integriert werden können. Darüber hinaus stellt die Integrationsschicht auch eine einheitliche Schnittstelle für die Planung und Ausführung administrativer Aufgaben zur Verfügung, um z.B. das virtuelle An- und Abschalten von Knoten für geplante Wartungsarbeiten in die Job-Abfolge einzubringen.

Ein Problem besteht in dem automatischen Auffinden von verfügbaren, passenden Ressourcen für die Ausführung neuer Jobs. Im DataGrid-Projekt haben wir dafür universelle Programme, sogenannte “Information Provider”, entwickelt, die Informationen über die vorhandenen Computing-Ressourcen eines Clusters bereitstellen.

Es ist davon auszugehen, daß in Zukunft auch die sehr großen Rechenzentren zunehmend HPC-Cluster betreiben werden, um ihren Benutzern preisgünstig adäquate Rechenleistung anbieten zu können. Dabei spielt der Lastausgleich und die Repräsentation der Ressourcen im Grid eine wichtige Rolle. Unsere zukünftigen Arbeiten zielen darauf ab, die lokalen Cluster im Grid effizient nutzbar zu machen und auf Basis der oben vorgestellten Systemarchitektur eine globale Lastverteilung im Grid zu ermöglichen.

### **Co-Reservierung von Ressourcen im Grid**

**Bearbeitet von:** Thomas Röblitz, Janis Bardins, Jörg Meltzer, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

**Kooperationspartner:** IBM Development Lab, Böblingen, Deutschland

**Förderung:** IBM Faculty Award

Ursprünglich gaben die Herausforderungen gegenwärtiger und zukünftiger Projekte in der Wissenschaft, zum Beispiel Hochenergiephysikexperimente des Large Hadron Collider (LHC) am CERN, den Anlaß, das Paradigma “Grid Computing”, d.h. der transparenten Ausführung von Rechnungen auf geographisch verteilten Rechenressourcen, zu entwickeln. Seit einiger Zeit engagiert sich nun auch die Industrie auf diesem Gebiet, um zum Beispiel im sog. Utility Computing den Nutzern flexibel Rechenleistung anbieten zu können. Ein zentraler Aspekt ist die Fähigkeit, getroffene Vereinbarungen, zum Beispiel die Anforderungen eines Jobs hinsichtlich der benötigten Rechenleistung, einzuhalten. Reservierungen von Ressourcen sind eine Möglichkeit, solche Vereinbarungen zu gewährleisten.

In diesem Projekt werden Methoden für die Reservierung von Ressourcen im Grid entwickelt und getestet. Eine besondere Eigenschaft der betrachteten Reservierungen ist ihre komplexe Gestalt. So sollen z.B. mehrere Ressourcen, die zu unterschiedlichen oder gleichen Zeiträumen benötigt werden, in Form einer einzigen Reservierung behandelt werden. Existierende Grid-Middleware soll geeignet erweitert werden, um komplexe Reservierungen unterstützen zu können. Dazu müssen zunächst die Grid-Ressourcen in die Lage versetzt werden, ihre lokalen Mechanismen für Einzelreservierungen "nach außen" zur Verfügung stellen zu können. Darauf aufbauend werden OGSA-Services entwickelt, die komplexere Reservierungen, die durch DAGs dargestellt werden können, durchführen.

### **BCB Forscher-Nachwuchsgruppe "Alignment und Threading auf massiv-parallelen Rechnern"**

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

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

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Die Forschungsaufgaben der Nachwuchsgruppe "Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern" im BMBF-Verbundvorhaben des "Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik" (BCB) umfassen die beiden Schwerpunkte Strukturvorhersage mit der Threading-Methode sowie Realisierung eines Applikationsportals für geeignete Bioinformatikanwendungen des BCB.

Für die beiden BCB-Gruppen des ZIB wurde ein 32+2 CPU-System (16 Dual-CPU-Rechenknoten und ein Dual-CPU-Frontend-Server) mit Myrinet-2000 als Clusternetzwerk installiert. Das Cluster-System ist seit Oktober 2002 im Produktionsbetrieb. Neben seiner Funktion als zentraler Zugangsrechner für den Cluster ist der Frontend-Server auch der Webhost der BCB-Domäne ([www.bcbio.de](http://www.bcbio.de)). Auf dem Cluster wurde das Softwarepaket "SRS" der Firma LION bioscience installiert und um eine erste BCB-spezifische Anwendung einschließlich Datenbank erweitert.

Die Fertigstellung einer ersten Version eines Threading-Frameworks ist weitestgehend abgeschlossen. Die parallele Implementierung erfolgte in C++ und MPI, MySQL dient dabei der Verwaltung der Sequenz- und Strukturdaten der Proteine. Der nächste Schritt wird den Test des Threading-Frameworks anhand einer geeignet auszuwählenden Benchmark-Suite umfassen.

Für die Erstellung von Sequenzprofilen, die dann zum Threaden benutzt werden können, sind u.a. Hidden-Markov-Modelle (HMM) vorgesehen. Eine parallele Implementierung von Basisalgorithmen für HMM-Berechnungen für Rechner mit verteiltem Speicher wurde umgesetzt. Damit wurde das Skalierungsverhalten der rechenaufwendigen Lernphase von HMM auf dem massiv-parallelen Rechner CRAY T3E [3] de-

monstriert.

### Publikationen

- [1] H.E. Bal, K.-P. Lühr, A. Reinefeld (eds.), *Proceedings of the 2nd IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid*, Berlin, 21-24 Mai 2002, IEEE Computer Science, Los Alamitos, CA, ISBN 0-7695-1582-7.
- [2] 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. ZIB Report 02-39, Dez. 2002.
- [3] M. Gollnick, *Paralleles multiples Alignment mit Hidden Markov Modellenn*, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin 2002.
- [4] S. Graupner, A. Andrzejak, V. Kotov, H. Trinks, *Adaptive Control Overlay for Service Management*, First Workshop on the Design of Self-Managing Systems (AASMS'03), San Francisco, 22-25 Juni 2003.
- [5] S. Graupner, A. Andrzejak, V. Kotov, *Visualizing Topology in Self-Organizing Management Overlays*, 7th International Conference on Information Visualization, IV03-AGT, London, 16-18 Juli 2003.
- [6] F. Schintke, T. Schütt, A. Reinefeld, *A Framework for Self-Optimizing Grids Using P2P Components*, International Workshop on Autonomic Computing Systems (ACS), Prag, September 2003.

## 2.3 Auszeichnungen und Rufe

### Andreas Eisenblätter

- Dissertationspreis 2002 der INFORMS Telecommunications Section
- Dissertationspreis 2002 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR)

### Christoph Helmberg

- Ruf auf eine C3-Professur für Wirtschaftsmathematik am Fachbereich Mathematik der Universität Kaiserslautern (angenommen zum 01.04.2003)
- Ruf auf eine C4-Professur für Algorithmische und Diskrete Mathematik an der Fakultät für Mathematik der Universität Chemnitz (angenommen zum 01.10.2003)

**Thorsten Hohage**

- Ruf auf eine Juniorprofessur für das Fachgebiet Integralgleichungen und Inverse Probleme an der Universität Göttingen, Fachbereich Mathematik, (angenommen)

**Gunnar W. Klau**

- Dissertationspreis 2002 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR)

**Rupert Klein**

- Ruf auf eine Professur für Combustion Theory and Computational Mathematics an der Princeton University, USA (abgelehnt)
- Ruf auf eine Professur für Angewandte Mathematik an der ETH Zürich, Schweiz (abgelehnt)
- Ruf auf eine Professur für Applied Mathematics an der Johns Hopkins University, USA (abgelehnt)

**Alexander Reinefeld**

- IBM Faculty Award for Grid Computing

## WISSENSCHAFTLICHE DIENSTLEISTUNGEN

### 3.1 Überblick

Die Aktivitäten im Arbeitsbereich Wissenschaftliche Dienstleistungen konzentrierten sich in diesem Jahr auf den weiteren Ausbau und die Konsolidierung des KOBV, die Internationalisierung des Math-Net und auf die konsequente Fortschreibung der bisherigen Aktivitäten im Museumsbereich. Einen weiteren Schwerpunkt bildete das jüngste Projekt Math&Industry, das eine Verbesserung der Bereitstellung mathematischer Informationen konkreter Anwendungsprojekte in der Industrie zum Inhalt hat.

*KOBV:* Das Jahr 2002 brachte für den erst im Jahre 2001 institutionell begründeten “Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg” (KOBV) bedeutende Fortschritte in einer Reihe von Punkten, in denen er aufgrund von organisatorischen und technischen Hemmnissen in Rückstand geraten war. Dazu gehören:

- die Verabschiedung der KOBV-Statuten und einer Beitragsordnung des KOBV mit erst dann möglicher Aufnahme einer Reihe von Bibliotheken als neue KOBV-Mitglieder;
- die Migration von Aleph 12.2 nach Aleph 14.2 und der nachfolgende substantielle Ausbau des Fremddatenbestandes mit Schwerpunkt der Library of Congress-Daten;
- die Weiterentwicklung der KOBV-Suchmaschine auf der Basis der neueren MetaLib, einschließlich eines neuen Erscheinungsbildes der Suchmaschine und der Web-Präsenz;
- die Erneuerung und Leistungssteigerung der Hardwarebasis des Produktionssystems mit einer Konsolidierung des Betriebes von Suchmaschine und Fremddatenserver;
- die Beschaffung eines zentralen Fernleihservers der Firma Sisis mit dem Ziele der Einrichtung einer automatisierten Fernleihe in einer heterogenen Systemumgebung;
- die genauere Spezifikation des KOBV-Informationsportals (als “Portal der Portale”) als gemeinsames Projekt der KOBV-Bibliotheken und der KOBV-Zentrale;

- der Entwurf des Verteilten Dokumentenspeichers des KOBV und seine Erweiterung als "Verteilter Zeitschriftenserver" als kooperatives Vorhaben der Verbundsysteme.

Die KOBV-Zentrale ist jetzt in der Lage, die institutionellen Aufgaben zu übernehmen, für die in der Projektphase des KOBV in den Jahren 1997 bis 2000 die Grundlagen geschaffen wurden. Die mit dem KOBV intendierte neuartige Form eines Bibliotheksverbundsystems kann nunmehr seine Kompetenz auch auf Gebieten erwerben, die bisher eher traditionellen Ausprägungen eines Bibliotheksverbundes vorbehalten waren. Der KOBV tritt damit in seine eigentliche Bewährungsprobe ein.

*Math-Net:* Das Math-Net-Projekt hat im Jahr 2002 mit seiner Konzeption internationale Anerkennung gefunden. Den formalen Höhepunkt dieser auf weitreichende Verbreitung der Math-Net-Idee (Publikation mathematischer Forschungs- und Entwicklungsergebnisse auf eigenen Servern) abzielenden Initiative des "Committee on Electronic Information and Communication" (CEIC) der International Mathematical Union (IMU) bildeten die Berichte über das Math-Net auf der General Assembly der IMU in Shanghai (August 2002) und beim "International Congress of Mathematicians" der IMU in Peking (August 2002). Diese "Olympiade der Mathematik" findet nur alle vier Jahre statt und markiert die Highlights mathematischer Forschung und Entwicklung. Die IMU und das CEIC haben die Institutionen mathematischer Forschung und Lehre dazu aufgerufen, die Ergebnisse ihrer Arbeit, Preprints, Forschungsergebnisse und mathematische Publikationen, ins Web zu stellen und ein internationales Netzwerk standardisierter mathematischer Portale zu schaffen. Zentrales Mittel zur Erlangung dieses Zieles ist ein standardisiertes Portal für die elektronischen Ressourcen mathematischer Institutionen (Fachbereiche und Forschungsinstitute).

*Math & Industry:* Die Mathematik ist eine Schlüsseltechnologie für moderne Industriezweige und ihre Dienstleistungen. Die Darstellung der entsprechenden Projekte im Web und dementsprechend ihre Breitenwirkung in einer zunehmend vernetzten Welt ist derzeit allerdings noch unzureichend. Das betrifft in besonderem Maße die Präsenz der anwendungsorientierten mathematischen Projekte in der Industrie. Diese zu verbessern und den Informationsaustausch über Ziele, Inhalte und Ergebnisse mathematischer Entwicklungen und Dienstleistungen zu fördern ist ein Ziel des Vorhabens Math&Industry. Die umfassende Präsentation im Web eröffnet nicht nur den Projekten selbst neue Möglichkeiten und Chancen, Industrie und Dienstleistungen gezielt auf das umfangreiche Potenzial mathematischer Methoden und Verfahren aufmerksam zu machen. Auch die Mathematik kann davon profitieren, wenn

- Kurzdarstellungen, Projektpartnerschaften und Projekthinhalte,
- realitätsnahe Beschreibungen und mit mathematischen Mitteln erfaßbare Probleme,

- mathematische Modellbildung und andere Methoden der mathematischen Lösung,
- Projektergebnisse, wie Anwendungen, Software und konkrete Produkte,

in standardisierter Art und Weise im Netz verfügbar sind. Hierfür hat Math&Industry in Anlehnung an das Math-Net-Projekt im Berichtszeitraum ein Schema zur Strukturierung der Web-Präsenz und Werkzeuge zum Aufbau und zum Betrieb eines verteilten Informations- und Kommunikationssystems entwickelt.

*Museumsprojekt:* Die Arbeitsgruppe “Informationstechnische Werkzeuge für Museen” hat den Focus ihrer auf Unterstützung von Inventarisierungs- und Dokumentationsvorhaben in Museen abzielenden Tätigkeit verstärkt auf die Mitarbeit in internationalen Gremien zur Standardisierung von Beschreibungen von Museumsobjekten gerichtet. Durch enge Kontakte zu auf nationaler und internationaler Ebene auf diesem Gebiet aktiven Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und dem “International Committee for Documentation of the International Council of Museums” (CIDOC) hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation jährlich abgehaltene Tagung findet bereits seit einigen Jahren traditionell im ZIB statt.

Das Museumsprojekt richtet seine service-orientierten Entwicklungen von Organisations- und Multimediawerkzeugen für Museen in erster Linie an den Bedürfnissen einer Vielzahl auch kleinerer Museen aus, denen sonst der Zugang zur Nutzung moderner Informations- und Kommunikationstechnologien verschlossen bleiben würde. Basissoftware für alle diese Projekte ist das von der britischen *Museum Documentation Association* (MDA) entwickelte Datenbanksystem GOS, das vom ZIB konsequent fortgeführt wird. Einen weiteren Schwerpunkt bildet die Unterstützung der Museen beim Aufbau eigener Server. Das bekannteste Beispiel hierfür ist der Server des Deutschen Historischen Museums, bei dessen Ausgestaltung das Museumsprojekt auch inhaltlich mitgewirkt hat.

Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.7 des Computeralgebrasystems REDUCE weiterentwickelt, Fehler behoben und es wurden neue Anwendungsprojekte begonnen oder fortgeführt. Es wurde die Fertigstellung der Version 3.8 vorbereitet, die für das Jahr 2003 geplant ist.

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. Insbesondere MathML ist im letzten Jahr ein Standard in der Softwareindustrie geworden.

Im Berichtszeitraum wurden auch die Aktivitäten im Bereich der parallelen Computeralgebra wiederaufgenommen. Eine enge Zusammenarbeit besteht dabei vor allem mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf in St. Catharines, Kanada. Dessen Universität verfügt über einen neuen, kostengünstigen Parallelrechner vom Typ Beowulf.

## 3.2 Schwerpunkte

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

**Bearbeitet von:** Maren Brodersen (08/2002–12/2002), Elke Durek (ab 08/2002), Martin Grötschel, Hildegard Franck, Lavinia Hodoroba, Uta Kaminsky, Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Litsche, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Dagmar Otto (bis 04/2002), Raluca Rascanu (ab 10/2002), Oliver Rudzick (bis 06/2002), Beate Rusch

**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, Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Der in 2001 begonnene organisatorisch-rechtliche Aufbau des KOBV wurde im Berichtszeitraum mit der Verabschiedung der Statuten und der Beitragsordnung abgeschlossen. Damit war Mitte 2002 die Basis geschaffen, daß der KOBV aktiv Mitglieder einwerben kann. Im Jahre 2002 sind elf neue Bibliotheken hinzugekommen, so daß am Jahresende die Zahl der KOBV-Mitglieder dreißig Hochschul- und Spezialbibliotheken und die beiden Verbände der öffentlichen Bibliotheken umfaßte; zudem drei Bibliotheken mit Gaststatus.

Dem neuen Status als regulärer Einrichtung entsprechend, hat die KOBV-Zentrale in 2002 das Erscheinungsbild der Web-Präsenz des KOBV mit professioneller Unterstützung grundlegend überarbeitet, angefangen vom neuen Logo bis hin zur Neugestaltung und Neustrukturierung der KOBV-Suchmaschine, des KOBV-Servers und des allgemeinen Web-Angebotes auf dem KOBV-Informationsserver.<sup>1</sup>

Der KOBV hat seit 1997 wesentlich dazu beigetragen, daß in der Region Berlin-Brandenburg eine moderne Informationsinfrastruktur aufgebaut wurde. Er setzt dabei konsequent auf neue Technologien, die im Zuge der Verbreitung des Internet und der Weiterentwicklung der Bibliothekstechnik entstanden sind. Mit der KOBV-Suchmaschine, dem virtuellen Verbundkatalog für die Region,<sup>2</sup> und dem KOBV-Bibliothekenführer, dem Gesamtverzeichnis der Berliner und Brandenburger Bibliotheken,<sup>3</sup> hat der KOBV zwei moderne Informationswerkzeuge entwickelt, in denen die Nutzer unabhängig von Zeit und Ort im Internet recherchieren können. Diese für Experten wie für Laien leicht handhabbaren Suchwerkzeuge stellt die KOBV-Zentrale "rund um die Uhr" — 24 Stunden am Tag, an 7 Tagen in der Woche — zur Verfügung. Der heutige Nutzer muß sich nur *eine* Internet-Adresse merken, um in einer Vielzahl von Bibliotheken zu suchen: in allen Universitäts- und Fachhochschulbibliotheken der Region, in der Staatsbibliothek zu Berlin, in vielen Spezialbibliotheken, in den öffentlichen Bibliotheken Berlins und Brandenburgs und — über die Region hinaus — in

<sup>1</sup>Informationen zum KOBV unter: <http://www.kobv.de>

<sup>2</sup><http://search.kobv.de>

<sup>3</sup><http://search.kobv.de/bibinfo.html>



allen deutschen Bibliotheksverbänden.

Als neue Entwicklungen in der KOBV-Suchmaschine sind — unter dem Gesichtspunkt der Web-Usability — die neue, verbesserte Nutzeroberfläche mit einer vereinfachten Navigation hervorzuheben, die die KOBV-Zentrale programmiert und im November 2002 öffentlich zugänglich gemacht hat. Zu Beginn des Jahres 2002 hat die KOBV-Zentrale mit dem KOBV-Bibliothekenführer ihren zweiten Internet-Dienst in Betrieb genommen. Erstmals kann sich der Nutzer im Internet über die regionalen Bibliotheken informieren, sei es über das Medienangebot oder die Sammelschwerpunkte, die aktuellen Öffnungszeiten, die Nutzungsbedingungen usw. Der Nutzer wird dabei durch vielfältige Suchmöglichkeiten unterstützt: über eine anklickbare Karte, über eine fachliche Suche, durch das Aufblättern von Listen usw. Die Pflege des KOBV-Bibliothekenführers erfolgt gemeinschaftlich durch die beteiligten Bibliotheken über eine Web-Schnittstelle; die Aktivitäten werden von der KOBV-Zentrale koordiniert.

Einen spürbaren Fortschritt brachte in der KOBV-Zentrale die lange erwartete Weiterentwicklung der eingesetzten Produkte, Aleph 500 und MetaLib, durch die Firma Ex Libris. Im Herbst 2002, mit einer Verzögerung von einem Jahr und neun Monaten, konnten die fünf Berliner Konsortialpartner — Freie Universität, Humboldt-Universität, Technische Universität, Universität der Künste und ZIB — schließlich von Aleph Version 12.1 auf Version 14.2 migrieren. So konnte die KOBV-Zentrale endlich ihr Fremddatenangebot erweitern und den Bibliotheken den dringend erwarteten Datenbestand der Library of Congress zur Verfügung stellen. Auch das Abnahmeverfahren zur KOBV-Suchmaschine konnte im Dezember 2002 erfolgreich zum Abschluß gebracht werden, nachdem Ex Libris insbesondere die Performance-Mängel ab MetaLib-Version 2.0 beseitigt hat. Im Zusammenhang mit der Hardware sind im Jahr 2002 ebenfalls wesentliche Verbesserungen in der KOBV-Zentrale zu verzeichnen: Da das eingesetzte Produktionssystem bis an die Grenzen der Kapazitäten ausgelastet war, wurde die Hardware insgesamt erneuert und im Zuge der Migration in Produktion genommen.

Die moderne Informationsinfrastruktur, die der KOBV aufgebaut hat, umfaßt auch die Entwicklung von Werkzeugen, mit deren Hilfe in den Bibliotheken Rationalisierungseffekte zu erreichen sind. Für die Bibliotheken ist insbesondere die Nutzung von Fremddaten in der Katalogisierung ein bedeutender betriebswirtschaftlicher Faktor. Eine substantielle Unterstützung stellt dabei das große Fremddatenangebot dar, das die KOBV-Zentrale allen KOBV-Bibliotheken auf dem zentralen Server zur Verfügung stellt und wöchentlich aktualisiert. Dieses lizenzierte Datenangebot konnte sie im Jahre 2002 durch die Daten der Library of Congress und durch den Verbundkatalog maschinenlesbarer Katalogdaten der deutschen Verbände wesentlich erweitern. Im Berichtszeitraum hat die KOBV-Zentrale zudem gemeinsam mit den Bibliotheken eine Initiative gestartet, um die Fremddatennutzung zu steigern. Im Zuge der Initiative hat die KOBV-Zentrale in 2002 damit begonnen, die vorhandenen Werkzeuge für das Copy Cataloguing — d.h. Datenübernahme per Mausklick mittels des Standardprotokolls Z39.50 — weiter zu optimieren. Als erste Maßnahme hat sie das

im Rahmen des KOBV-Projektes entwickelte Z39.50-Gateway ZACK, das die Datenübernahme über das Internet ermöglicht, aktualisiert und durch Einbindung weiterer Z39.50-Datenbanken ausgebaut. Auch erste Schritte zum Aufbau einer "Z39.50-Vermittlungsagentur", die die Fremddatenübernahme der KOBV-Bibliotheken aus anderen Verbänden organisiert und koordiniert, hat die KOBV-Zentrale eingeleitet.

Der Schwerpunkt der Aktivitäten im Forschungs- und Entwicklungsbereich lag im Projekt "KOBV-Informationportal", das die KOBV-Zentrale als gemeinsames Entwicklungsprojekt mit den regionalen Bibliotheken 2001 initiiert hat. Zielsetzung ist der Aufbau eines kooperativen regionalen Portals mit Einsatz von Linking-Mechanismen zur "nahtlosen" Navigation in freien und lizenzierten Dokumenten und mit Einsatz von Instrumenten zur dezentralen Authentifizierung über das Internet. Die Teilprojekte der 1. Stufe — Evaluation ausgewählter Portalsoftware sowie des Produktes SFX, Aufbau des regionalen Bibliothekenführers, Problemanalyse Zeitschriften und Spezifikation der Anforderungen für die Online-Fernleihe — konnten, wie geplant, Anfang 2002 abgeschlossen werden. Im Laufe des Jahres hat die KOBV-Zentrale insgesamt drei "Portale-Workshops" durchgeführt, um die Bibliotheken zu informieren und die gemeinsamen Diskussionen mit den Bibliotheken anzustoßen. Die Diskussionsrunden zu den beiden Schwerpunktthemen "Navigation" und "Access" wurden per Mailingliste geführt. Im Berichtszeitraum hat das KOBV-Entwicklerteam die konzeptionelle Arbeit so weit abgeschlossen, daß ein Prototyp für die Navigation entwickelt und als Basis für die gemeinsame weitere Diskussion mit den Bibliotheken ins Netz gestellt wurde.<sup>4</sup> Für den Zugriff auf lizenzierte und freie Materialien hat das Entwicklerteam ein Schema zur Beschreibung der elektronischen Ressourcen der KOBV-Bibliotheken für Zwecke der Navigation in der "digitalen Bibliothek" der Länder Berlin und Brandenburg, sowie zur Darstellung der Zugriffsberechtigungen auf die einzelnen Komponenten (Ampelschema) entwickelt.

Wesentlich komplexer und schwieriger als ursprünglich angenommen, hat sich der Bereich "Dezentrale Authentifizierung/Verteilte Zugriffskontrolle" erwiesen. Neben der technischen Realisierung des anvisierten regionalen Zugriffs auch auf lizenzierte Materialien sind auf lokaler Ebene die organisatorisch-rechtlichen Voraussetzungen, d.h. insbesondere die lizenzrechtlichen Bedingungen der Verlage in den örtlichen Einrichtungen, zu klären und ggf. zu schaffen. Konkret begonnen hat die KOBV-Zentrale in 2002 mit der Realisierung der Online-Fernleihe, eines Internetdienstes, den die Nutzer als Standardservice eines Bibliotheksverbundes erwarten. Im 2. Halbjahr 2002 hat die KOBV-Zentrale den Zentralen Fernleihserver (ZFL-Server) der Firma Sisis beschafft. Als zusätzliche Komponenten hat sie eine Reihe von Programmen für die automatische Nachrecherche und automatische Leitwegsteuerung selbst entwickelt, erfolgreich getestet und in den Workflow des ZFL-Servers eingebunden. Im IV. Quartal 2002 hat die KOBV-Zentrale zudem mit verschiedenen Bibliotheken, die unterschiedliche Lokalsysteme einsetzen, Absprachen für die Einbindung in die Online-Fernleihe getroffen sowie Musterkonfigurationen entworfen und zur Verfügung gestellt: mit der Staats-

<sup>4</sup><http://se3.kobv.de/cgi-bin/navigation>

bibliothek zu Berlin, die Mitglied im Gemeinsamen Bibliotheksverbund ist und das Pica-System einsetzt, mit der Stadt- und Landesbibliothek Potsdam, die einen Prototypen für die Einbindung von Horizon-Bibliotheken entwickelt, sowie mit dem Verbund der öffentlichen Bibliotheken des Landes Brandenburg, der über einen eigenen Fernleihkreis in die regionale Online-Fernleihe eingebunden werden soll. Unerwartete Schwierigkeiten gab es mit den Kommunikationsschnittstellen der Sisis- und Aleph-Lokalsysteme, so daß die Kommunikationstests bis zum Jahresende erst ansatzweise aufgenommen werden konnten.

Als weiteres regionales Entwicklungsprojekt hat die KOBV-Zentrale in 2002 gemeinsam mit den Universitätsbibliotheken der Freien Universität, der Humboldt-Universität und der Universität Potsdam das Projekt "Verteilter Dokumentenspeicher"(VDS) gestartet. Zielsetzung ist es, den langfristigen Zugriff auf lizenzierte elektronische Zeitschriften der Verlage sicherzustellen und elektronische Dokumente der KOBV-Bibliotheken mit moderner Informationstechnologie zugänglich zu machen. Perspektivisch wird auch die Langzeitarchivierung eine Rolle spielen. In dem Projekt sind zum einen technische Probleme zu lösen, wie die Speicherung und der verteilte Zugriff auf lizenzierte Materialien, zum anderen — in Zusammenarbeit mit den Konsortien — die grundlegenden Voraussetzungen zu schaffen, nämlich die notwendigen Lizenzrechte mit den Verlagen auszuhandeln und vertraglich abzusichern. Hier erwartet die KOBV-Zentrale Synergieeffekte zum Projekt "KOBV-Informationsportal". Der dezentralen Struktur des KOBV entsprechend hat die KOBV-Zentrale ein modulares Konzept entwickelt, das offen ist für eine Vielzahl von Beteiligten. Ausgehend von diesem anspruchsvollen regionalen Projekt hat die KOBV-Zentrale — auf der Basis des modularen KOBV-Konzeptes — zwei überregionale Projekte initiiert: "Verteilter Zeitschriftenserver" (VZS) der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme und "Verteilter Contentspeicher" (VCS), an dem weitere Informationsanbieter beteiligt werden sollen. Hintergrund für das VZS-Projekt ist die Tatsache, daß die Sicherung des langfristigen Zugriffs auf alle in Deutschland lizenzierten elektronischen Zeitschriften nur in gemeinsamer Anstrengung aller Beteiligten auf überregionaler Ebene zu erreichen ist. Die Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme hat die Federführung für das VZS-Projekt der KOBV-Zentrale übertragen. Im Rahmen des Projektes hat die KOBV-Zentrale zwei Workshops durchgeführt, an denen sich die Bibliotheksverbände und Einzelbibliotheken mit einschlägigen Erfahrungen beteiligt haben. Für das VCS-Projekt, das alle elektronischen Materialien im Fokus hat, konnte die KOBV-Zentrale BMBF-Mittel für ein sechsmonatiges Vorprojekt einwerben, das im IV. Quartal 2002 angelaufen ist. Im Rahmen des Vorprojektes führt die KOBV-Zentrale erste Tests bezüglich Download, Speicherung und Zugriff auf Verlagsdaten durch.

### **Publikationen**

- [1] Monika Kuberek: *Der KOBV – eine regionale Service-Einrichtung für Nutzer und Bibliothekare*, in: *Bibliotheksdienst* 36 (2002), Heft 4, S. 453–463.

- [2] Beate Rusch: *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg*, in: The Proceedings of Digital Library – IT Opportunities and Challenges in the New Millennium. Sun Jiazheng (ed.) Beijing, 2002, pp. 702–709.

### 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

Das Jahr 2002 war für die Internationalisierung der Math-Net-Initiative außerordentlich wichtig.

Das 'Committee on Electronic Information and Communication' der International Mathematical Union (IMU), auf dem Weltkongreß der Mathematiker 1998 gegründet, berichtete auf der General Assembly (Shanghai, August 2002) und dem 'International Congress of Mathematicians' (Beijing, August 2002) über seine Arbeit zur Verbesserung der elektronischen Information und Kommunikation in der Mathematik, insbesondere auch über die Math-Net-Aktivitäten (Vorträge M. Grötschel). Für diese Veranstaltungen hat das ZIB die Broschüre "Recommendations on Information and Communication" erstellt. Die Arbeit des CEIC und die Math-Net-Aktivitäten fanden breite Anerkennung und Zustimmung bei den Mathematikern und Fachgesellschaften. Das CEIC hat den Auftrag, Math-Net als weltweites Informations- und Kommunikationssystem auszubauen und weiterzuentwickeln.

Math-Net setzt auf die standardisierte und verteilte Bereitstellung der Informationen durch die Mathematiker und mathematischen Institutionen. Die Standards sollen die automatische Zusammenfassung und Verarbeitung der Informationen, die von Mathematikern und Institutionen bereitgestellt werden, gestatten.

Das erfordert den Einsatz und die Nutzung der im Rahmen der Weiterentwicklung des Web zum Semantic Web entwickelten Techniken, insbesondere Extensible Markup Language (XML), Resource Description Framework (RDF), RDF Schema und Ontology Web Language (OWL). Math-Net setzt konsequent auf diese Entwicklungen auf und gehört zu den Pilotanwendern im Bereich der Semantic-Web-Technologien.

Eine wichtige Aktivität innerhalb der Math-Net-Initiative ist die Math-Net-Seite. Die Math-Net-Seite ist ein standardisiertes Portal für die Web-Ressourcen mathematischer Institutionen (Fachbereiche, Forschungsinstitute). Für mathematische Fachgesellschaften wurde im letzten Jahr ein Vorschlag erarbeitet. Die Math-Net-Seite umfaßt die Kerninformationen der Institutionen. Diese Informationen sind in 6 Gruppen und den dazugehörigen Untergruppen organisiert (Klassifikationsschema der Math-Net-Seite).

Die Math-Net-Seite ist in RDF/XML kodiert, für die Beschreibung der Math-Net-Seite

wurde ein RDF Metadatenschema definiert.

IMU und CEIC haben die mathematischen Institutionen dazu aufgerufen, Math-Net-Seiten zu generieren und ins Netz zu stellen<sup>5</sup>. Gegenwärtig haben weltweit ca. 200 mathematische Institutionen Math-Net-Seiten installiert.

Zur Erstellung der Math-Net-Seiten bietet das ZIB den Math-Net-PageMaker<sup>6</sup> an. Der Einsatz des PageMakers hat sich bewährt.

Der Math-Net-Navigator<sup>7</sup> ist der Math-Net-Dienst, der

- einen effizienten Zugang zu der Information auf den Math-Net-Seiten bieten und
- Informationen für andere Math-Net-Seiten bereitstellen soll.

Dazu sammelt der Math-Net-Navigator alle Math-Net-Seiten täglich ein und wertet diese aus.

Im Berichtszeitraum wurde der Math-Net-Navigator grundlegend überarbeitet.

Der Math-Net-Navigator bietet jetzt folgende Zugangsmöglichkeiten zu den Informationen der Fachbereiche

- Suche über Web-Seiten,
- Navigation über die Math-Net-Seiten nach geografischen Kriterien,
- Navigation über die Math-Net-Seiten entsprechend dem Klassifikationsschema der Math-Net-Seite.

Während die beiden ersten Zugangsmethoden auch von den großen Suchmaschinen wie etwa Google geleistet werden, setzt der Math-Net-Navigator auf die im Math-Net spezifisch entwickelte Strukturierung der Informationen auf.

Der Math-Net-Navigator ist skalierbar. Auf der Top-Level-Ebene werden alle Institutionen der Welt aufgelistet, die Math-Net-Seiten anbieten. Der Math-Net-Navigator offeriert aber auch länderspezifische Auswertungen, die jeweils wiederum die Suche über die entsprechenden Math-Net-Seiten, die geografische Navigation und die Navigation entlang der Strukturierung der Math-Net-Seite anbieten.

Basis dafür ist eine MySQL-Datenbank, deren wesentlicher Inhalt die URLs der installierten Math-Net-Seiten der beteiligten Institutionen bilden. Diese werden automatisch ausgewertet, was jetzt aufgrund der verwendeten RDF-Codierung in konsistenter Form möglich ist.

Der neue Math-Net-Navigator erlaubt zudem eine bessere Verzahnung der hier bereitgestellten Informationen mit anderen Math-Net-Diensten. Wenn auf einer neuen Math-Net-Seite etwa Preprints ausgewiesen werden, wird die Information (die URL

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

<sup>6</sup><http://www.math-net.org/pagemaker>

<sup>7</sup><http://www.math-net.org/navigator>

der Preprints) an den Math-Net Preprint Index (MPRESS) weitergeleitet. Dieser indexiert dann die Preprints des Servers, falls sie noch nicht in MPRESS vorhanden sind.

Das zentrale Math-Net-Portal der Math-Net-Initiative<sup>8</sup> wird am ZIB gepflegt. Diese Web-Seiten wurden im Berichtszeitraum neu gestaltet und inhaltlich erweitert.

Ein weiterer wichtiger Schritt zum Ausbau des Math-Net ist die Entwicklung einer standardisierten individuellen Homepage für Mathematiker. Dazu hat das ZIB Ende des vergangenen Jahres einen ersten Entwurf erstellt.

Math-Net ist auf gutem Wege, zu einem führenden Informations- und Kommunikationssystem für mathematische Information zu werden. Das ZIB ist – wie oben ausgeführt – eine der Institutionen in der Math-Net-Initiative, die die Entwicklungen sowohl im organisatorischen als auch im technischen Bereich wesentlich tragen und vorantreiben.

Mathematische Informationen sind nicht nur für Mathematiker interessant. Auch Wissenschaftler anderer Fachrichtungen, Forscher und Entwickler aus dem Bereich Industrie und Dienstleistungen oder Studenten, Schüler und Lehrer brauchen mathematische Informationen. Folglich muß bei der Entwicklung des Math-Net darauf geachtet werden, daß die Bereitstellung der Informationen interoperabel und kompatibel zu anderen wissenschaftlichen Informationssystemen ist, so daß etwa Informationen unterschiedlicher Systeme miteinander verknüpft werden können.

Deshalb beteiligen sich DMV und ZIB an der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften seit ihrer Gründung. Das ZIB hat die eigenen Ansätze und Entwicklungen im IuK-Bereich auf Tagungen der IuK-Initiative und anderer Fachgesellschaften vorgestellt. Das soll – auf der konzeptionellen und technischen Ebene – die enge Zusammenarbeit im IuK-Bereich über die Grenzen der Mathematik hinaus stärken.

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

**Bearbeitet von:** Wolfgang Dalitz, Winfried Neun, 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

Die Internetpräsentationen von Projekten, die Anwendungen der Mathematik zum Inhalt haben, beschränken sich zumeist auf wenige formale Angaben und Informationen zur mathematischen Behandlung. Problembeschreibung, Modellierung und Ergebnisse werden häufig nur kurz dargestellt.

Gerade auch umfassendere Präsentationen im Web eröffnen den Projekten neue Möglichkeiten und Chancen, Industrie und Dienstleistungen gezielt auf das riesige Potenzial mathematischer Methoden und Verfahren aufmerksam zu machen und neue An-

---

<sup>8</sup><http://www.math-net.org>

wendungsgebiete für die Mathematik zu erschließen. Das erfordert insbesondere, daß

- die Informationen über Projekte der angewandten Mathematik systematisiert werden,
- die Präsentation der Informationen an den Anforderungen und Erfordernissen der Anwender ausgerichtet wird,
- Methoden und Verfahren entwickelt werden, die einen effizienten Zugang zu den Informationen ermöglichen (z.B. müssen Anwender Projekte in der ihnen vertrauten Sprache identifizieren und suchen können).

Das Projekt Math&Industry soll wesentlich dazu beitragen, die im Web verfügbaren Informationen über Projekte der angewandten Mathematik zu verbessern.

Der erste Schritt im Projekt Math&Industry war die Erstellung eines Konzepts für die Darstellung von Projekten der angewandten Mathematik. In Anlehnung an die Math-Net-Seite wurde ein zweistufiges Schema für die Strukturierung der Webpräsentation der Projekte entwickelt. Dieses Schema umfaßt auf der oberen Ebene<sup>9</sup>

- eine Kurzdarstellung des Projekts, die sowohl die Zielstellung als auch die Projektdaten beinhaltet (“Projektübersicht”),
- die Ergebnisse des Projekts (“Anwendungen und Produkte”),
- Informationen über die Personen, Firmen und Institutionen, die am Projekt mitarbeiten (“Beteiligte”),
- eine Beschreibung des realen Problems (“Das Problem”),
- eine Darstellung der Modellierung (“Modelle”),
- Ansätze und Methoden zur mathematischen Lösung (“Mathematische Behandlung”).

Jeder dieser Bereiche ist in weitere Teilpunkte untergliedert. Zudem wurden Vorgaben zur Beschreibung einzelner Informationen, etwa für die beteiligten Personen entwickelt (‘Metadatenschemas’).

Eine besondere Schwierigkeit liegt darin, daß für die Problembeschreibung, die Modellierung und die mathematische Behandlung i. a. unterschiedliche Vokabulare Verwendung finden. Um den Anwender zu unterstützen, die für ihn relevanten Projekte zu finden, sieht das Konzept vor, Glossare für die Bereiche Problem, Modelle, Mathematische Behandlung aufzubauen. Die Begriffe in und zwischen den Glossaren sollen zueinander in Beziehung gesetzt werden.

Für drei Modellprojekte aus den Bereichen Umweltforschung, Verkehrsplanung und Materialforschung wurden auf der Basis des vorgeschlagenen Konzepts Webpräsentationen erstellt.

---

<sup>9</sup><http://soft-pc3.zib.de/help.html>

Das Konzept für die Webpräsentation von Projekten wurde auf dem Statusseminar des BMBF-Mathematikprogramms vorgestellt und diskutiert.

Die Erstellung der Webpräsentationen ist technisch aufwendig und ohne vorhandene Werkzeuge fehleranfällig. Es war also notwendig, Werkzeuge zur Erstellung solcher strukturierten Projektpräsentationen zu entwickeln. Der WebSiteMaker, eine gemeinsame Entwicklung vom IWI Osnabrück und dem ZIB, liegt in einer ersten Testversion<sup>10</sup> vor.

Math&Industry ist als ein verteiltes Informations- und Kommunikationssystem konzipiert. Die Webpräsentationen der Projekte sind die Basis. Die Informationen der Projekte, insbesondere die Metadaten der Projekte, erlauben die differenzierte Auswertung der Informationen durch Internet-Indexe und Suchmaschinen, im speziellen durch das zentrale Portal von Math&Industry<sup>11</sup>. Mit dem Aufbau des zentralen Portals wurde begonnen.

Im laufenden Jahr sollen die Projekte des BMBF-Mathematikprogramms beginnen, ihre Webpräsentationen auf Basis des erarbeiteten Konzepts zu erstellen. Diese Informationen werden dann für den Ausbau des zentralen Portals genutzt.

### 3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

**Bearbeitet von:** C. Saro, R. Stein, D. Jung, S. Orth (bis Februar 2002), Marc Schwer (ab Sept. 2002)

**Kooperationspartner:** Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin - Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IfM), Bayerisches Nationalmuseum (BNM, München), Deutsches Historisches Museum (DHM, Berlin), Deutsches Hygiene Museum Dresden (DHMD), Museum im Wasserwerk (Berlin-Friedrichshagen), Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG (Bielefeld), Kulturhistorisches Museum Rostock, Stadtgeschichtliches Museum Leipzig, Pommersches Landesmuseum Greifswald, Medizinhistorisches Museum Berlin

Aufgabe der Arbeitsgruppe ist die Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen. In interdisziplinärer Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern verschiedener geisteswissenschaftlicher Fachrichtungen werden Projekte durchgeführt, die den Museen die Nutzung moderner Informationstechnik erschließen. Durch enge Kontakte zu entscheidenden Gremien, wie der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und der CIDOC (International Committee for Documentation of the International Council of Museums), hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation jährlich im Herbst durchgeführte Tagung findet seit mehr als 10 Jahren traditionell am ZIB statt.

Die im Rahmen der Fachgruppe gegründete Arbeitsgruppe "Datenaustausch" wird

---

<sup>10</sup><http://soft-pc3.zib.de/signup.htm>

<sup>11</sup><http://www.mathematik-21.de>



vom ZIB koordiniert. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten. Ein Ziel ist die Überprüfung der Praxistauglichkeit des von der CIDOC entwickelten "Conceptual Reference Model" (CRM), welches sich zur Zeit im Prozeß der Normierung durch die ISO befindet. Dieser wird von einer internationalen Special Interest Group (SIG) begleitet, an der sich auch das ZIB beteiligt. Das Modell versteht sich als "domain ontology" (im informationstechnischen Sinn) und ermöglicht das Verständnis und den Vergleich unterschiedlicher Ansätze zur Datenstrukturierung.

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 Pommerschen Landesmuseum Greifswald sowie mit dem Medizinhistorischen Museum Berlin 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 bereits im Sommer 1996 eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen Historischen Museums <http://www.dhm.de/datenbank> umfaßt dank der kontinuierlichen Verbesserung und Erweiterung inzwischen über 220.000 Datensätze mit etwa 150.000 digitalisierten Objektbildern. Sie stellt damit das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland dar. Die Nutzung liegt mit 2.000–5.000 Anfragen pro Woche weiterhin sehr hoch.

Auch die Internet-Datenbank des Bildarchivs am Deutschen Historischen Museum <http://www.dhm.de/datenbank/bildarchiv.html>, 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 in den Vorjahren entwickelte Intranet-Anwendung wurde weiter ausgebaut. Sie

ermöglicht einen sehr einfachen und schnellen Zugang zu der Originaldatenbank auch für Mitarbeiter, die mit der verwendeten Datenstruktur nicht vertraut sind.

Ähnliche Anwendungen wurden vom ZIB auch für andere Museen (z.B. Deutsches Hygienemuseum) weiterentwickelt.

### 3.2.5 REDUCE

#### Weiterentwicklung von REDUCE

**Bearbeitet von:** Winfried Neun, Herbert Melenk

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

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln anwendbar primär in Ingenieur- und Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt von REDUCE liegt bei qualitativ hochwertigen Algorithmen für schwierige und umfangreiche Anwendungsfälle. Eine der an der Entwicklung von REDUCE beteiligten Gruppen befindet sich am ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über das Web abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweiten Update). Im Berichtszeitraum wurden an der Version REDUCE 3.7 weitere Verbesserungen fertiggestellt und freigegeben sowie die Dokumentation überarbeitet. Es ist geplant, im Jahr 2003 die Version REDUCE 3.8 freizugeben.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Dadurch konnten im Bereich der Algorithmen zur symbolischen Lösung von Gleichungssystemen, Berechnung von Gröbnerbasen und Techniken der Faktorisierung wesentliche Weiterentwicklungen der letzten Jahre implementiert werden.

In Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf wurde für die Brock University in St. Catharines, Kanada ein System zur computergestützten Bewertung der mathematischen Vorkenntnisse der Studenten der Universität 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. Anlässlich eines Besuches von Winfried Neun an der Brock University wurde das System weiterentwickelt und den Dozenten der Universität vorgestellt.

Ebenfalls in Zusammenarbeit mit Thomas Wolf wurden Arbeiten zur *parallelen Com-*

*puteralgebra* wiederbelebt, die in der Mitte der neunziger Jahre ihren Ursprung hatten. Der Anlass war die aktuelle Verfügbarkeit von preiswerten und sehr leistungsfähigen Parallelsystemen (sog. *Beowulf Cluster*), die auch kleinen Instituten die Anschaffung eines Parallelrechners erlaubt. Dadurch wird parallele Computeralgebra wesentlich weiter verbreitbar als es bisher möglich war. Thomas Wolf hat eine experimentelle parallele Version seiner Software CRACK erstellt.

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. Das System wurde im Berichtszeitraum durch ein leistungsfähigeres ausgetauscht.

Im Rahmen des von der Europäischen Union geförderten Projekts **OpenMath** wurde an der Integration von REDUCE in dieses system- und plattformübergreifende Softwaremodell gearbeitet. Das ZIB beteiligt sich am Thematischen Netzwerk "OpenMath" mit der Integration von OpenMath Standards in REDUCE.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 21.000,- Euro 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 Hochleistungsrechner am ZIB

Der Berliner Landeshochleistungsrechner ist ein verteiltes System aus diversen Komponenten für Berechnungen und Datenhaltung. Es besteht zum einen aus dem Parallelrechner CRAY T3E, dem im Sommer 2002 stillgelegten Vektorrechner CRAY J90 sowie den Berliner Anteilen an den Hochleistungsrechnern der Länder Niedersachsen und Schleswig-Holstein im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechner-Verbunds (NVV) und zum anderen aus dem im Jahr 2002 im Rahmen des HLRN-Verbunds neu beschafften massiv parallelen System IBM pSeries 690. Wesentliche Leistungsparameter der Rechnersysteme sind der Tabelle 4.1 zu entnehmen.

#### 4.1.1 Hochleistungsrechner Nord (HLRN)

Mit der Vertragsunterzeichnung am 18. März 2002 und der Inbetriebnahme des IBM p690 Hochleistungsrechners im Sommer 2002 konnten im Berichtszeitraum gleich zwei wichtige Meilensteine auf dem Weg zum gemeinsamen Norddeutschen Hochleistungsrechner gefeiert werden. Vorangegangen war eine sehr aufwendige Ausschreibungs- und Auswahlphase mit einem erfolgreich abgeschlossenen vergaberechtlichen Nachprüfungsverfahren.

Gemäß der Vereinbarung der sechs norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein wird der HLRN-Rechner als verteilter Supercomputer an den Standorten ZIB/Berlin (Teilsystem "berni") und RRZN/Hannover (Teilsystem "hanni") betrieben. Die sechs Länder teilen sich die Investitionskosten in Höhe von ca. 20 Mio. Euro, während die Standländer Berlin und Niedersachsen zusätzlich die laufenden Kosten (Personal, Wartung, Strom, Klima usw.) tragen.

Der HLRN-Supercomputer ist ein IBM p690 System, das aus insgesamt 24 RegattaH-Knoten mit je 32 Power4 CPUs (1,3 GHz) besteht, die über ein schnelles Verbindungsnetzwerk miteinander gekoppelt sind. Das System besitzt ca. 2 Terabyte Hauptspeicher sowie ein Storage Area Netzwerk (SAN) mit ca. 52 Terabyte SAN Plattenspeicherplatz. Mit seinen insgesamt 768 Power4-Prozessoren bietet das System eine Spitzenleistung von ca. 4 TeraFlop/s. Im Jahr 2003 wird das derzeit installierte Colony-Netzwerk gegen das neue, leistungsfähigere Federation-Netzwerk ausgetauscht (siehe

Abbildungen 4.1 und 4.2).

Ein weiterer wichtiger Meilenstein auf dem Weg zum gemeinsamen Betrieb des HLRN-Supercomputers war die Einrichtung des *Wissenschaftlichen Ausschusses* des HLRN. Unter der Leitung von V. Linke (FU Berlin), der bereits zuvor den Zulassungsausschuß des ZIB erfolgreich geleitet hat, fand die konstituierende Sitzung des Wissenschaftlichen Ausschusses am 30.09.2002 in Berlin statt. Der Ausschuß tagt quartalsweise jeweils an einem der HLRN-Standorte und beschließt über die Vergabe von Rechenzeit auf dem HLRN-System.

Nach der anfänglich freien Rechenzeitvergabe im Rahmen von sogenannten Schnupperkontingenten fand die erste reguläre Sitzung des Wissenschaftlichen Ausschusses, in der über Rechenzeitlimits für die einzelnen Projekte entschieden wurde, am 13.02.2003 statt. Zu dieser Sitzung lagen dem Ausschuß Anträge vor, die mehr als das Dreifache der zur Verfügung stehenden Rechenzeit auf dem HLRN-System umfaßten! Diese Zahl zeigt nicht nur, daß der HLRN-Supercomputer von den Forschern gut angenommen wird, sondern daß ein Hochleistungsrechner dieser Leistungsklasse in Norddeutschland längst überfällig war.



ABBILDUNG 4.1: Installation des IBM p690 am ZIB, ©Peter Meißner, Berlin

#### 4.1.2 Systemkonfiguration und Software-Ausstattung

##### Parallelrechner CRAY T3E

Der inzwischen fünf Jahre alte Parallelrechner CRAY T3E war auch im Jahr 2002 noch das Hauptsystem für die Berliner HPC-Benutzer. Wegen der Verzögerungen bei



ABBILDUNG 4.2: IBM p690 am ZIB, ©Peter Meißner, Berlin

der Beschaffung des HLRN-Systems und dem weiterhin stark gestiegenen Rechenzeitbedarf haben wir das CRAY-System noch einmal kostengünstig um 128 Prozessoren auf nunmehr 512 Anwendungsprozessoren erweitert. Diese Kapazitätserweiterung ist von der Benutzerschaft umgehend angenommen worden, die Auslastung des erweiterten Systems konnte gegenüber dem Vorjahr wiederum verbessert werden (ca. 85% über das ganze Jahr hinweg).

### **Vektorrechner CRAY J90**

Der Vektorrechner CRAY J90 (16 Prozessoren, Spitzenleistung 3,2 GFlop/s, 8 GByte gemeinsamer Hauptspeicher) ging nach einer Nutzungsdauer von sieben Jahren am 31.8.2002 außer Betrieb.

### **Datenhaltungssystem STK 9310**

Beim Datenhaltungssystem STK 9310 wurden im Berichtszeitraum die Umstellung auf die leistungsstärkeren Magnetbandgeräte vom Typ STK 9940 B mit einer Datentransferrate von 30 MB/s (gegenüber 10 MB/s der bisherigen Geräte) sowie der Anschluß an das IBM-System des HLRN vorbereitet.

**Software-Ausstattung** Einen Überblick über die Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner liefert die Tabelle 4.2.

	Parallelrechner <i>berni</i> IBM pSeries 690 (Teilkomplex Berlin)	Parallelrechner <i>berte</i> CRAY T3E LC 512
Prozessoren	384 Power4	544 DEC Alpha EV5.6-21164
Taktfrequenz	1,3 GHz	408 PEs mit 450 MHz 136 PEs mit 600 MHz
Hauptspeicher	1024 GByte	89 GByte
Topologie	SP Switch-2 (Colony)	3-dimensionaler Torus
Transferrate	8 x 200 MByte/s	480 MByte/s
Bisektionsbandbreite	19,2 GByte/s	122 GByte/s
Ein-/Ausgabe-System	SAN über FC-Links	3 GigaRinge
Transferrate	1,7 GByte/s	$\geq 1$ GByte/s
Plattenspeicher	26 TByte	1046 GByte
Transferrate		10–17 MByte/s
Ges. Transferrate	1728 MByte/s	940 MByte/s
Anschlüsse für	über 5 Server mit je	5 SCSI mit je
Bandlaufwerke	10 MByte/s	20 MByte/s
Netzanschlüsse	über 3 Server mit je 2 Gbit-Ethernet- Interfaces (je 125 MByte/s)	FDDI mit 12,5 MByte/s
Theor. Spitzenleistung	2 TFlop/s	524 GFlop/s

Tabelle 4.1: Konfiguration der Hochleistungsrechner

	Parallelrechner <i>berni</i> IBM pSeries 690	Parallelrechner <i>berte</i> CRAY T3E LC 512
Betriebssystem	AIX	UNICOS/mk
Systemsoftware	GPFS, LoadLeveler, PE, PSSP	DMF, NQE
Compiler	XL C, Visual Age C++, XL Fortran	ANSI C, C++, CF90, HPF
Programm- entwicklung	TotalView, VaMPIr	TotalView
Tools	ACTC Tools, Global Arrays, Linux Toolbox, METIS, MPI, netCDF, PVM	CrayTools, HDF5, MPICH, MPT, netCDF, PVM
Numerik	Aztek, ATLAS, BLACS, LAPACK, NAG Fortran Lib., ScaLAPACK	Aztec, CrayLibs, C++ Tools, C++ MathPack, NAG Fortran Lib.
Visualisierung	EnSight, FERRET, GrADS, Ncview	CVT
Ingenieurwissen- schaften	ABAQUS, FLUENT, GAM- BIT, ANSYS ( <i>hanni</i> )	
Chemie	CPMD, Gaussian98, MOL- PRO, NAMD, NWChem, TURBOMOLE, VMD	AMBER, DGauss, GAMESS (UK), NWChem, TURBO- MOLE

Tabelle 4.2: Software-Ausstattung der Hochleistungsrechner

### 4.1.3 Ausgewählte Großprojekte

#### Zulassungsausschuß

Der Ausschuß für die Begutachtung von Rechenzeitanträgen für den Berliner Landeshochleistungsrechner (Zulassungsausschuß des ZIB), dessen Aufgabe in der Unterstützung besonders wichtiger Forschungsvorhaben mit erheblichem Ressourcenbedarf liegt, 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. Auf Grund der voraussichtlichen Außerbetriebnahme der CRAY T3E im Laufe des Jahres 2003 hat dieser Ausschuß letztmalig am 02. Juli 2002 getagt.

#### Großprojekte

Das Spektrum der Nutzerschaft hat sich gegenüber dem Vorjahr kaum verändert.



Der Rechenzeitverbrauch durch die einzelnen Fachgebiete entspricht im wesentlichen den zugeteilten Rechenzeitkontingenten. Im Berichtszeitraum verteilte sich der Gesamtverbrauch der Berliner Großprojekte im wesentlichen auf die vier Fachgebiete wie folgt (in Klammern jeweils die Werte aus dem Vorjahr): Chemie 40% (40%), Physik 29% (30%), Ingenieurwissenschaften 17% (16%) und Geowissenschaften 13% (14%). Die neuen Projekte aus dem Fachgebiet Biologie nahmen weiterhin nur wenig Rechenzeit auf (1%).

Die folgenden elf größten Projekte im Jahr 2002 auf der CRAY T3E haben jeweils für einen Zeitraum von bis zu zwölf Monaten 76.850 ZPL<sup>1</sup> bewilligt bekommen, das sind ca. 76% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Zulassungsausschuß bewilligten Rechenkapazität:

- Chemie: *Periodische sowie Cluster- und Embedded Cluster-Rechnungen zur Struktur, Dynamik und Reaktivität unterschiedlicher Vanadiumoxidaggregate mit Ab-initio-Methoden*, HU Berlin, 18.000 ZPL.
- Geowissenschaften: *Hochauflösende Modellierung der thermohalinen Zirkulation*, CAU Kiel, 12.000 ZPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik katalytisch relevanter Systeme*, HU Berlin, 12.000 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Beeinflussung von Diffusorströmungen durch aktive Strömungskontrolle*, TU Berlin, 6.000 ZPL.
- Chemie: *Alkalimetalle als Promotoren in der heterogenen Katalyse am Beispiel der CO-Oxidation auf der cäsiierten RU(0001) Oberfläche*, FU Berlin, 6.000 ZPL.
- Physik: *Raum-zeitliche Strukturbildung in den zirkumstellaren Hüllen kühler Sterne*, TU Berlin, 5.000 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Simulation und Beeinflussung ablösender turbulenter Grenzschichten*, TU Berlin, 4.350 ZPL.
- Ingenieurwissenschaften: *TurboNoiseCFD*, TU Berlin, 4.000 ZPL.
- Physik: *Untersuchung der Aoki-Phase in der Gitter-QCD mit chiralem Quellterm*, HU Berlin, 3.500 ZPL.
- Physik: *Optoelektronische Eigenschaften von Halbleiterquantenpunkten*, TU Berlin, 3.000 ZPL.
- Physik: *Simulation der elastischen Wellenausbreitung*, FU Berlin, 3.000 ZPL.

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

---

<sup>1</sup>Eine ZPL entspricht 16 Prozessorstunden auf der CRAY T3E

## **Hochauflösende Modellierung der thermohalinen Zirkulation im Nordatlantischen Ozean**

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

Großräumige ozeanische Strömungssysteme werden entscheidend mitbestimmt von Prozessen auf vergleichsweise kleinen räumlichen Skalen, die vor allem in einigen wenigen Schlüsselregionen eine große Rolle spielen können. Insbesondere die südwärtige Ausbreitung des im Nordatlantik gebildeten Tiefenwassers im unteren Ast des sogenannten globalen "Conveyor Belt" ist hiervon betroffen: im Bereich der großen Neufundlandbank beispielsweise trifft der sehr schmale und tiefreichende südwärtige Randstrom (Breite ca. 20 km) auf die Fortsetzung des Golfstroms, den Nordatlantischen Strom, der etwa fünfmal soviel Wasser nach Nordosten transportiert.

Die Dynamik dieser Situation ist bisher weder in ozeanographischen Messungen ausreichend erfasst noch aus den grundlegenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten heraus vollkommen verstanden, da Nichtlinearitäten des Systems in Form von intensiver mesoskaliger Turbulenz dominieren. So ist unklar, ob der tiefe Strom zwischen Küste und Nordatlantischem Strom seinen Weg um die Neufundlandbank weiter nach Südwesten verfolgt, oder ob er aufgrund der Wechselwirkung mit dem Gegenstrom einen Umweg nehmen muss, ehe er dann schließlich weiter im Süden wieder als konzentrierter Randstrom in Erscheinung tritt.

Zur Klärung dieser Frage und zur Untersuchung der Implikationen für die Ausbreitung von zeitlich variablen Signalen aus dem subpolaren Nordatlantik spielen numerische Ozeanmodelle eine wichtige Rolle. Sie ermöglichen es, gezielte Studien 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 bisher 202 Prozessorelementen der Cray T3E Rechnung getragen.

Die so erreichte horizontale Auflösung von 5 km erlaubt zum Beispiel den Vergleich simulierter Messbojen mit tatsächlich im Ozean eingesetzten Systemen: zu diesem Zweck werden numerische "Wasserpakete" im tiefen westlichen Randstrom definiert, deren Ausbreitung als Teilchenbahn (Trajektorie) anhand des modellierten Strömungsfeldes mit der Zeit verfolgt wird. Für eine große Zahl von Wasserpaketen (typischerweise einige Hundert bis zu 10000), die den Querschnitt des Stroms im Aussetzgebiet gut abdecken, ergibt sich dann eine Wolke von Teilchenbahnen, die den Verlauf einzelner Strömungsbänder wiedergibt.

Anhand der Trajektorien in verschiedenen Experimenten lässt sich auf diese Weise zeigen, dass tatsächlich das Wirbelfeld des Nordatlantischen Stroms eine wichtige Rolle spielt. Im glatten, mittleren Strömungsfeld sind deutlich mehr Teilchen in der Lage, die Südspitze von Neufundland zu umrunden als im intensiven Wirbelfeld der zeitlich variablen Simulation (Abbildung 4.3). Allerdings scheinen selbst im zeitlich gemit-

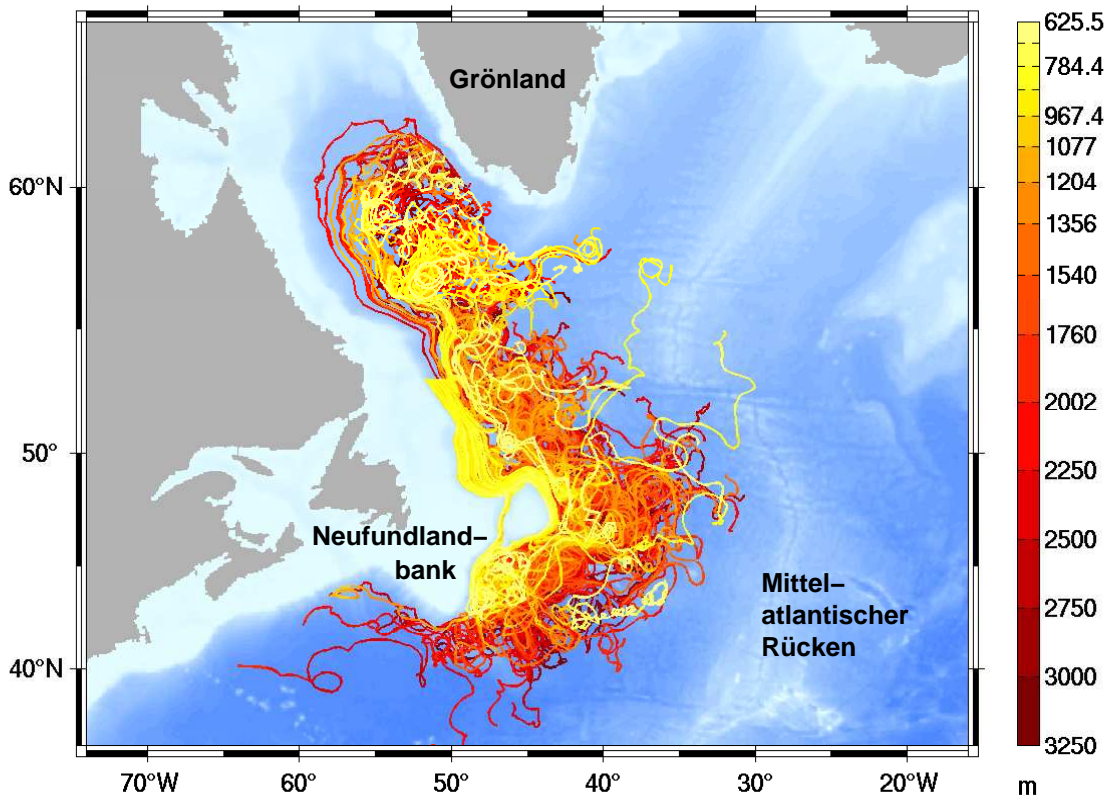


ABBILDUNG 4.3: Teilchenbahnen und Aufenthaltstiefe (m) von Wasserpaketen, die entlang 53°N in Tiefen von 800 m bis 3500 m ausgesetzt wurden. Integrationsdauer: 2 Modelljahre (graue Farbtöne geben die Wassertiefe wieder).

telten Fall Stellen zu existieren, wo sich (vermutlich aufgrund der Bodentopographie) Teile des Randstroms von der Küste abschälen. (Genauere Untersuchungen hierzu sind noch in Arbeit.)

Diese Arbeiten sind Teil internationaler Großprojekte (CLIVAR) und nationaler Vorhaben (SFB 460 der Universität Kiel).

### Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik katalytisch relevanter Systeme

**Bearbeitet von:** Joachim Sauer (Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin)

Zeolithe sind mikroporöse Materialien und stellen eine wichtige Klasse von Festkörperkatalysatoren dar, die in der chemischen Industrie für vielfältige Zwecke genutzt werden. Das zentrale Interesse gegenwärtiger Forschungsaktivitäten auf diesem Gebiet gilt dem detaillierten Verständnis der Eigenschaften katalytisch aktiver Zentren sowie der Aufklärung von Elementarreaktionen chemischer Umsetzungen an diesen Zentren.

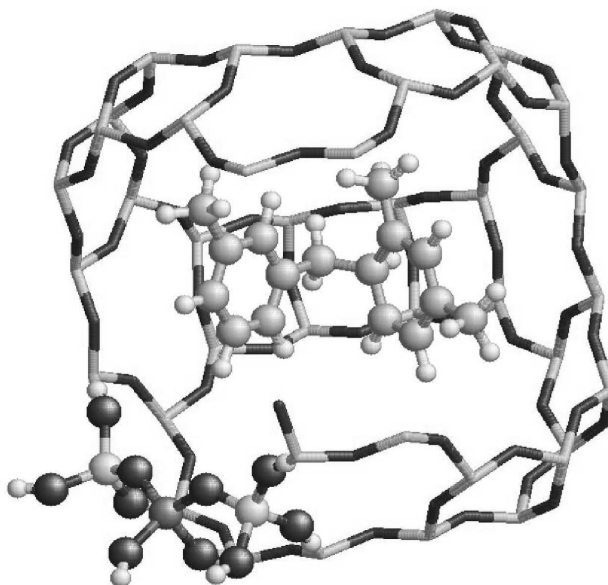


ABBILDUNG 4.4: Konformation des Diphenylmethan-Carboniumions in einer Elementarzelle des Zeoliths Faujasit (FAU). Die bei Verwendung der gekoppelten QM/MM-Beschreibung das QM-System bildenden Atome sind als Kugel-Stab-Modell dargestellt. Die verbleibenden Atome sind Bestandteil des mit einem empirischen Kraftfeld beschriebenen periodischen Systems. Kontrollrechnungen mit CPMD beschreiben beide Systeme einheitlich auf quantenmechanischem Niveau.

Zur Beantwortung solcher Fragen hat sich in den letzten Jahren ein von uns entwickeltes Kopplungsverfahren [1] bewährt, in dem quantenchemische und Kraftfeldverfahren kombiniert werden (QM/MM-Ansatz). Solche Verfahren wurden im Projekt zur Bearbeitung zweier Fragestellungen eingesetzt: (a) Aufklärung der Struktur katalytisch aktiver Zentren im Zeolithen Cu-ZSM-5, insbesondere hinsichtlich der möglichen Existenz von dimeren Reaktionszentren des Typs  $ZCu_2O_2Z$ , sowie Aufklärung von Elementarschritten der katalytischen Zersetzung von NO an diesen Zentren. (b) Untersuchungen zur Dynamik von Protonentransferprozessen an aziden Zentren in Zeolithen. Das am ZIB beantragte Kontingent wurde benutzt, um die Anwendbarkeit des QM/MM-Kopplungsschemas anhand von Berechnungen ausgewählter Systeme auf DFT-Niveau mit Hilfe des CPMD-Codes zu prüfen. Abbildung 4.4 zeigt die Konformation eines Intermediats der Zeolith-katalysierten Dehydrogenierung von Diphenylmethan, [2] die nach Geometrieoptimierung auf DFT-Niveau erhalten wurde. Diese Rechnung benötigte 10 Läufe mit je 8 Stunden Wallclock-Zeit auf 200 PE's der Cray T3E am ZIB (16.000 CPU-h bzw. 1000 ZPL).

## Publikationen

1. J. Sauer und M. Sierka, *Combining quantum mechanics and interatomic potential functions in ab initio studies of extended systems*, J. Comput. Chem. **21** (2000), 1470–1493.
2. L.A. Clark, M. Sierka und J. Sauer, *Stable Mechanistically-Relevant Aromatic-Based Carbenium Ions in Zeolite Catalysts*, J. Am. Chem. Soc. **125** (2003), 2136–2141.

## Beeinflussung von Diffusorströmungen durch aktive Strömungskontrolle

**Bearbeitet von:** E. Wassen und F. Thiele (Hermann-Föttinger-Institut, TU Berlin)

Diffusoren sind einfache strömungsmechanische Bauteile, die in vielen Bereichen der Strömungs- und Verfahrenstechnik verwendet werden. In einem Diffusor erweitert sich der Querschnitt eines durchströmten Rohrs oder Kanals. Dies hat zur Folge, dass sich die Strömungsgeschwindigkeit verringert und gleichzeitig der Druck in der Strömung erhöht. Anders ausgedrückt, es wird kinetische Energie in potenzielle Energie umgewandelt. Durch die Verringerung der Strömungsgeschwindigkeit wird z.B. der Reibungsverlust des durchströmten Bauteils stark vermindert, da die Größe dieses Verlustes proportional zum Quadrat der Geschwindigkeit ist.

Nur bei sehr kleinen Öffnungswinkeln des Diffusors (bis ca.  $6^\circ$  Halbwinkel) ist die Strömung in der Lage, im Bereich der Querschnittserweiterung der Wandkontur zu folgen. Bei größeren Winkeln folgt die Strömung zunächst der Wand, löst aber aufgrund des positiven Druckgradienten weiter stromab von der Wand ab und bildet ein Rückström- oder Rezirkulationsgebiet (druckinduzierte Ablösung). Bei noch größeren Öffnungswinkeln ( $> 22^\circ$ ) kann die Strömung aufgrund ihrer Trägheit der Wandkontur nicht mehr folgen und löst unmittelbar am Beginn der Querschnittserweiterung ab (geometrieinduzierte Ablösung). Eine Strömungsablösung ist in jedem Fall unerwünscht und kontraproduktiv, da sie stets zu zusätzlichen Energieverlusten führt. Sie kann jedoch häufig nicht vermieden werden, da konstruktionstechnische Beschränkungen (z.B. Platzmangel) die Wahl ausreichend kleiner Öffnungswinkel nicht zulassen.

In dem aktuellen Projekt werden Möglichkeiten untersucht, das Rezirkulationsgebiet – und damit die Verluste – durch eine aktive Beeinflussung der Strömung zu verkleinern. Es wird beispielhaft ein axialsymmetrischer Diffusor mit einem Öffnungshalbwinkel von  $18^\circ$  betrachtet. Die Strömungsbeeinflussung erfolgt durch eine periodische, sinusförmige Anregung (Einblasen/Absaugen) durch einen Ringschlitz, der unmittelbar an der Kante am Beginn der Querschnittserweiterung angebracht ist. In der Praxis bzw. im Experiment lässt sich eine solche Art der Anregung relativ einfach mit Hilfe einer vibrierenden Lautsprechermembran realisieren.

Zur Berechnung der turbulenten Strömung im Diffusor wird die Large-Eddy-Simulation (LES) verwendet. Im Gegensatz zur Direkten Numerischen Simulation (DNS), bei der alle in der Strömung vorhandenen turbulenten Strukturen zeitlich und

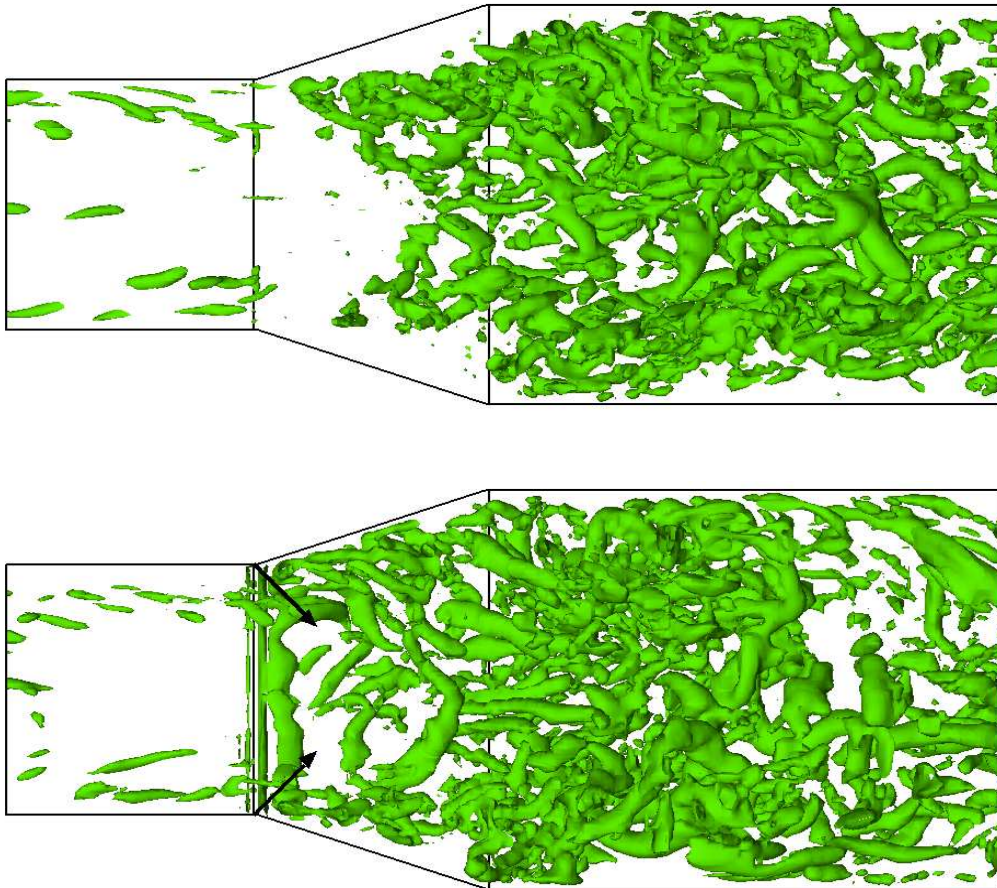


ABBILDUNG 4.5: Visualisierung von Wirbelstrukturen in der unbeeinflussten Strömung (oben) und in der angeregten Strömung (unten).

räumlich aufgelöst werden, werden mit der LES nur die dominanten energiereichen Strukturen berechnet. Dadurch wird eine erhebliche Verringerung des Rechenaufwands erreicht. Der Einfluss der Feinstruktur, die nicht explizit berechnet wird, wird mit Hilfe von Subgrid-Scale-Modellen berücksichtigt.

Im Rahmen des zur Zeit laufenden Projekts konnte eine Reduzierung des Druckverlustes von über 40% erzielt werden. Gleichzeitig wurde eine Verkleinerung des Rückströmgebiets in der selben Größenordnung erreicht. Durch die periodische Anregung der Strömung werden Wirbel erzeugt, die eine stärkere Durchmischung von schnellem Fluid im Diffusorkern und langsamem Fluid im Rezirkulationsgebiet bewirken. Dies ist deutlich in der Abbildung 4.5 zu erkennen. In dieser Abbildung sind turbulente Wirbelstrukturen visualisiert, wobei im oberen Teil die unbeeinflusste Grundströmung und im unteren Teil die angeregte Strömung dargestellt ist. Bei der letzteren erkennt man deutlich die verstärkte Wirbelbildung im Bereich unmittelbar stromab

der Abströmkante. Die in der Abbildung gezeigten Pfeile deuten die Position und die Richtung der Anregung an. Der dargestellte Zeitpunkt befindet sich in der ersten Hälfte der Anregeperiode, d.h. in der Ausblasephase.

Das aktuelle Projekt ist eingebettet in den Sonderforschungsbereich 557 – Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen – an der TU Berlin.

### **Raum-zeitliche Strukturbildung in den zirkumstellaren Hüllen kühler Sterne**

**Bearbeitet von:** P. Woitke, K.S. Jeong, J.M. Winters, Ch. Helling und E. Sedlmayr (Zentrum für Astronomie und Astrophysik, TU Berlin)

Viele astrophysikalische Objekte zeigen im Detail eine wolkenartige innere Struktur, die das optische Erscheinungsbild und das dynamische Verhalten der Objekte stark beeinflusst.

Ziel dieses Projektes ist es, diese Strukturbildungs- und Selbstorganisationsphänomene im Falle der Winde von kühlen, sogenannten AGB-Sternen zu simulieren und zu verstehen. Hierbei kommt dem Phasenübergang von der gasförmigen Materie hin zu kleinen Festkörperteilchen (Staubbildung) eine entscheidende Rolle zu.

In verschiedenen, teilweise mehrdimensionalen Modellrechnungen, die neben der zeitabhängigen Staubbildung einen detaillierten Strahlungstransport und die Hydrodynamik des Staub-Gas-Gemisches umfassen, werden insbesondere thermische und radiative Instabilitäten identifiziert und die auf diese Weise erregten Strukturbildungsprozesse analysiert.

Abbildung 4.6 zeigt, wie sich unter Einwirkung des vom zentralen Stern emittierten Strahlungsfeldes der Staub im wesentlichen in Form einer Schale, aber im Detail in Form von vielen zum Zentrum hin orientierten linearen Strukturen um einen AGB-Stern bildet.

### **Untersuchung der Aoki-Phase in der Gitter-QCD mit chiralem Quellterm**

**Bearbeitet von:** E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler, M. Müller-Preußker, A. Sternbeck (Institut für Physik, HU Berlin) und H. Stüben (ZIB)

In der Gitter-QCD mit Wilson-Fermionen hat Aoki die Existenz einer Phase postuliert, in der Paritäts- und Flavour-Symmetrie spontan gebrochen sind. Das dahinterliegende physikalische Anliegen ist die Frage, auf welche Weise die Pionmasse fernab vom Kontinuumslikes masselos werden kann.

Zur numerischen Untersuchung dieses Phasenübergangs wird die Wirkung der 2-Flavour-QCD um einen chiralen Quellterm  $h\bar{\psi}i\gamma_5\tau_3\psi$  ergänzt und der Ordnungsparameter  $\langle\bar{\psi}i\gamma_5\tau_3\psi\rangle$  bestimmt. Im Doppel-Limes unendlich großen Volumens und  $h \rightarrow 0$  sollte der Ordnungsparameter innerhalb der Aoki-Phase einen endlichen Wert annehmen und außerhalb verschwinden.

Die Rechnungen konnten in dem zu untersuchenden Parameterbereich auf kleinen Gittern ( $6^4$  bis  $10^4$ ) durchgeführt werden, die bei den untersuchten Eichkopplungen

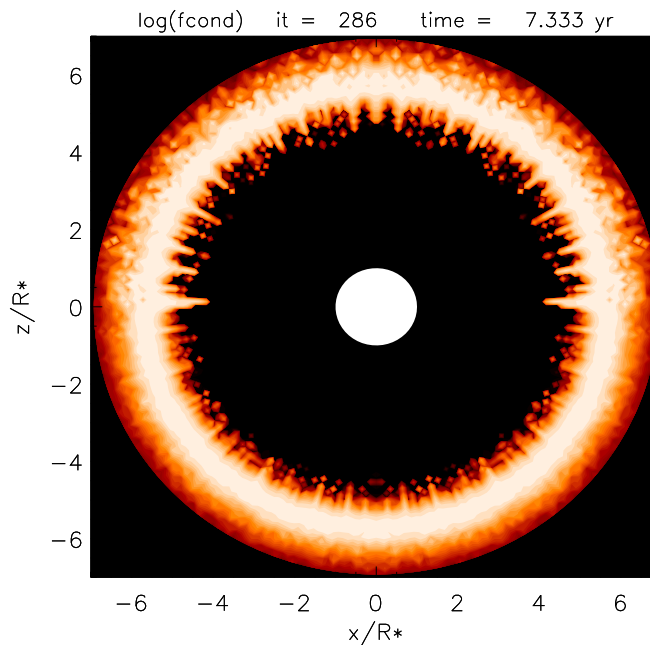


ABBILDUNG 4.6: Contourplot des berechneten Staub-zu-Gas-Verhältnisses (Kondensationsgrad) in der Umgebung eines AGB-Sterns, der durch den zentralen weißen Kreis dargestellt ist.

praktisch als unendlich groß angesehen werden können. Bei  $\beta = 4.0$  und  $\beta = 4.3$  konnte die Aoki-Phase zweifelsfrei nachgewiesen werden (siehe Abbildung 4.7), wobei erstmals eine überzeugende Extrapolation  $h \rightarrow 0$  durchgeführt wurde. Für größere  $\beta$  konnten im Rahmen der zur Verfügung stehenden Rechenzeit keine definitiven Aussagen gewonnen werden, hier müßte man deutlich größere Gitter verwenden.

### Simulation der elastischen Wellenausbreitung in der Explorationsseismik und Seismologie

**Bearbeitet von:** Erik H. Saenger, Stefan Buske, Oliver S. Krüger, Tobias M. Müller, Mi-Kyung Yoon und Serge A. Shapiro (Institut für Geologische Wissenschaften, FU Berlin)

Es ist ein fundamentales Interesse der Geophysik, die Ausbreitung elastischer Wellen in beliebig komplizierten Strukturen zu verstehen, zu beschreiben, vorherzusagen und zu berechnen. Die moderne Seismologie und angewandte Seismik bedient sich zunehmend numerischer Verfahren, um die Wellenausbreitung in den komplexen Strukturen von Erdkruste, Erdmantel und Kohlenwasserstofflagerstätten zu modellieren.

Ausgehend von einer seismischen Quelle wird die zeitliche Entwicklung des Wellenfeldes durch eine Finite-Differenzen (FD) Lösung der elastischen Differentialgleichung berechnet (siehe z.B. Saenger et al., 2000). Das Wellenfeld wird an bestimmten Orten im Medium registriert und man erhält sogenannte Seismogramme für die Kom-



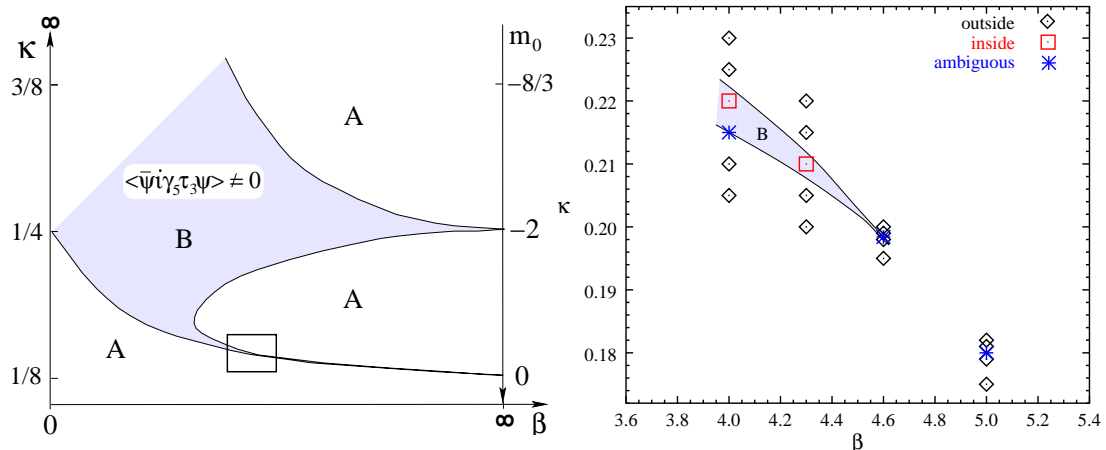


ABBILDUNG 4.7: Das von Aoki postulierte Phasendiagramm (links) und Ergebnisse der Untersuchung (rechts). Der kleine Kasten (links) deutet den untersuchten Parameterbereich an.

ponenten des Wellenfeldes. Diese synthetischen Seismogramme sind Grundlage für viele geophysikalische Problemstellungen. Zum Beispiel können reale seismologische Experimente modelliert werden und damit ein Vergleich mit den realen Seismogrammen gemacht werden. Dies ist zum Beispiel für den SFB 267 “Deformationsprozesse in den Anden”, dem unsere Arbeitsgruppe angehört, von wesentlicher Bedeutung.

Eine weitere Anwendung der Modellierungen ist u.a. für die Kohlenwasserstoffexploration von Interesse. FD-Modellierungen können herangezogen werden, um effektive elastische Eigenschaften von heterogenen Strukturen (z.B. Lagerstätten) numerisch zu bestimmen und die Vielzahl bestehender theoretischer Konzepte zu verifizieren. Eine direkte analytische Lösung der Wellengleichung ist für die genannte Problemstellung aufgrund der hohen Komplexität nicht möglich. Daher werden bisher vor allem Laborexperimente herangezogen, um theoretische Vorhersagen zur Wellenausbreitung in stark heterogenen Medien zu überprüfen. In diesem Projekt ist jedoch folgendes Konzept angewendet worden: Das Laborexperiment wird durch eine sehr gut zu kontrollierende Computersimulation ersetzt.

Durch den gezielten Einsatz der Cray T3E am ZIB ist es möglich, sinnvolle 3D-Modelle mit verschiedenartigen Rissen mit ausreichender Statistik zu untersuchen. Ein Rechenbeispiel mit ca. 125.000.000 Gitterpunkten ist in Abbildung 4.8 gezeigt. Es zeigt eine ebene Kompressionswelle, die von oben durch eine heterogene Struktur verzögert und gedämpft wurde. Die Auswertung einer Vielzahl solcher Simulationen konnte z.B. die Streudämpfungs-Vorhersagen der klassische Hudson-Theorie bestätigen. Des Weiteren wurde nachgewiesen, daß die “differential effective medium (DEM)”-Theorie einen größeren Gültigkeitsbereich besitzt als zunächst angenommen (Saenger et al., 2003).

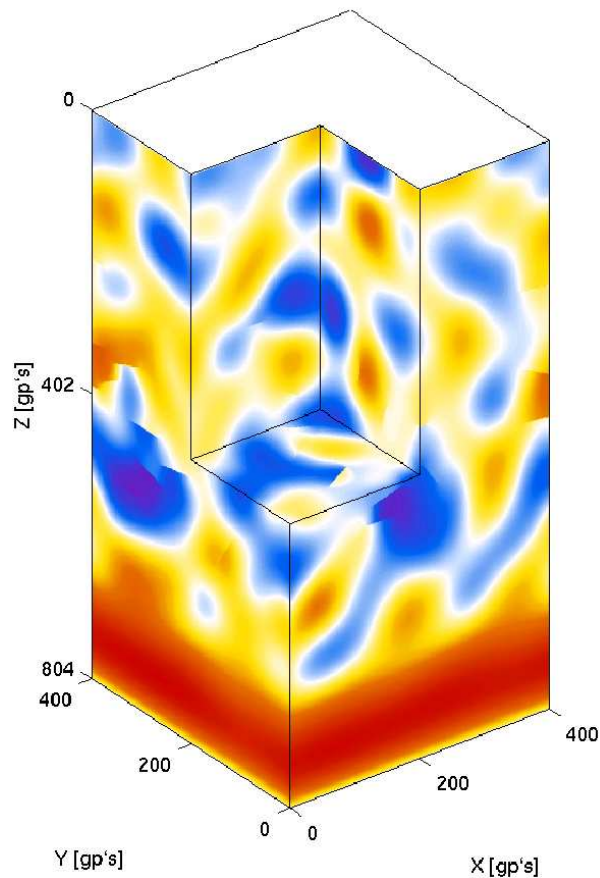


ABBILDUNG 4.8: Ausbreitung einer ebenen (Schall-) Welle in einem stark heterogenen elastischen 3D-Medium. Mit Hilfe solcher Computersimulationen können die effektiven elastischen Eigenschaften stark heterogener Medien studiert werden.

### Publikationen

1. Saenger, Gold and Shapiro, 2000: Modeling the propagation of elastic waves using a modified finite-difference grid. *Wave Motion*, **31**, 77–92.
2. Saenger, Krüger and Shapiro, 2003: Numerical Rock Physics: Effective Elastic Properties of 3D Fractured Media. EAGE, Expanded Abstracts, p. 251.

### Untersuchung der Auswirkungen des Anstiegs von Treibhausgasen auf das Klima

**Bearbeitet von:** Katrin Nissen, Lee Grenfell, Kirstin Krüger, Markus Kunze, Ulrike Langematz, Katja Matthes, Peter Mieth und Karin Labitzke (Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin; <http://strat-www.met.fu-berlin.de/>)

Zur Untersuchung der Auswirkung des Treibhausgasanstiegs auf das Klima wurden Simulationen mit einem Klima-Chemiemodell (Climate-Chemistry Model, kurz: CCM)

der mittleren Atmosphäre (FUB-CCM) durchgeführt. Das reine Atmosphärenmodell (FUB-CMAM für Climate Middle Atmosphere Model) wurde für diese Untersuchungen erheblich erweitert: a) Kopplung mit einem Modul für die chemischen Reaktionen in der Atmosphäre [5], b) Einführung eines Algorithmus für den Transport chemischer Spurengase [siehe Beschreibung in 3] und c) eine Schwerewellenparametrisierung. Das entstandene CCM reicht vom Erdboden bis in die Mesosphäre (ca. 80 km Höhe). Mit dem Modell können Wechselwirkungen zwischen der Strahlung, Dynamik und Chemie der mittleren Atmosphäre untersucht werden. Indem man beobachtete Emissionen von Treibhausgasen und gemessene Meeresoberflächentemperaturen als realistische Randbedingungen vorgibt, können mit einem solchen Modell die Auswirkungen der Erhöhung von Treibhausgasen durch den Menschen auf das Klima untersucht und Vorhersagen für das Klima der Zukunft getroffen werden.

Dafür wurden im wesentlichen 4 Modellexperimente durchgeführt. Zum einen wurden zwei sogenannte Zeitscheibenexperimente zu je 20 Jahren gerechnet, bei denen die Randbedingungen den mittleren Zustand der 80er Jahre bzw. der Jahrtausendwende repräsentieren. Des weiteren wurden zwei 20-jährige Modellsimulationen unter transienten Bedingungen, d.h. mit kontinuierlich, den Beobachtungen/Vorhersagen folgenden Randbedingungen durchgeführt. Diese Modellläufe umfassen die Perioden 1980 bis 2000 und 2000 bis 2020.

Zunächst wurde damit begonnen, die Modellsimulationen auszuwerten, die das Klima der näheren Vergangenheit beschreiben. Diese Modellergebnisse können mit vorhandenen atmosphärischen Messungen verglichen werden. Nur bei guter Übereinstimmung des Modellklimas der Vergangenheit zur Wirklichkeit kann man den Vorhersagen für die Zukunft vertrauen. Das Modell zeigt in allen Modellexperimenten, daß die Zunahme der Treibhausgase in der Atmosphäre zu einer Erwärmung der Troposphäre und zu einer Abkühlung der Stratosphäre im Zeitraum von 1980 bis 2000 führt. Abbildung 4.9 zeigt stellvertretend die Differenz der Jahresmitteltemperatur aus den Zeitscheibenexperimenten. Der Temperaturtrend ist in weiten Bereichen signifikant. Beobachtungen und Modellsimulationen anderer Forschungsgruppen zeigen ebenfalls eine Erwärmung der Troposphäre und eine Abkühlung der Stratosphäre.

Durch die Veränderungen in der Atmosphärenzusammensetzung ist auch das Ozonfeld betroffen. Modellsimulationen und Beobachtungen zeigen eine Abnahme des Ozons in den polaren Breiten der unteren Stratosphäre. Für die Troposphäre berechnet das Modell eine Zunahme des Ozons, die durch den Anstieg von NO<sub>x</sub> Emissionen durch Industrie und Flugzeuge hervorgerufen wird. Auch Messungen zeigen eine Zunahme des in diesen erdnahen Schichten gesundheitsschädlichen Ozons.

Mit Hilfe des Zukunftsszenarios soll untersucht werden, ob und wann durch die Protokolle von Montreal und Kyoto zur Reduktion von Treibhausgasen und Halogenen eine Erholung der Ozonschicht und/oder eine Abschwächung der Temperaturtrends zu erwarten ist. Erste Ergebnisse zeigen, daß zumindest die Temperaturtrends in der Troposphäre und Stratosphäre bis zum Jahr 2020 unvermindert anhalten.

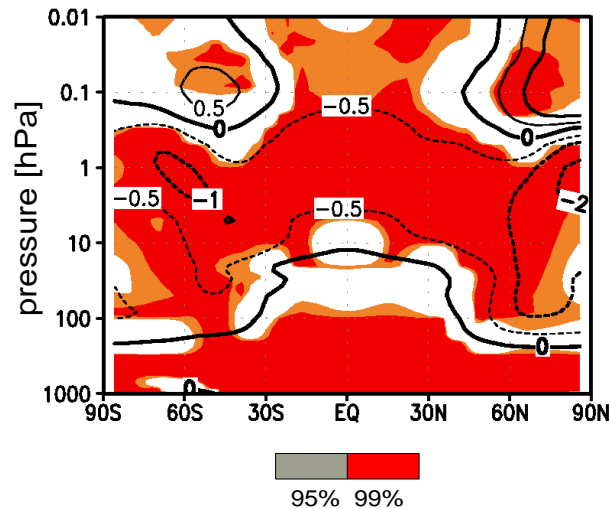


ABBILDUNG 4.9: Jahresmittel der zonal gemittelten Temperaturänderung in den Zeitscheibenexperimenten: Modellsimulation 1980 – 2000 in Kelvin pro Dekade. Schattiert sind Gebiete, in denen der Temperaturtrend eine Signifikanz von 99% (dunkelrot) bzw. 95% (hellrot) aufweist.

Die Stratosphärengruppe der Freien Universität Berlin beschäftigt sich außerdem mit dem Einfluß der Sonnenvariabilität auf das Klima im Rahmen eines weiteren EU-Projektes (SOLICE: Solar Influences on Climate and the Environment) und eines weiteren BMBF-Projektes (MESA: Modellstudien zum Einfluß der Sonnenvariabilität auf die Atmosphäre; Teil des KIHZ-Projektes).

### Publikationen

1. U. Langematz: An estimate of the impact of observed ozone losses on stratospheric temperature, *Geophys. Res. Lett.*, Vol.27, NO.14, 2077-2080, 2000.
2. U. Langematz, M. Kunze, K. Krüger, K. Labitzke und G. L. Roff: Thermal and dynamical changes in the stratosphere since 1979 and their link to ozone and CO<sub>2</sub> changes, *J. Geophys. Res.*, 108(D1), 4027, doi:10.1029/2002JD002069, 2003.
3. K. Krüger: Untersuchung von Transportprozessen in der Stratosphäre: Simulationen mit einem globalen Zirkulationsmodell, Dissertation, Fachbereich Geowissenschaften FU-Berlin, 161 S., 2002.
4. U. Langematz: Modellstudien zum klimatologischen Einfluss stratosphärischer Ozonänderungen, Habilitation, Fachbereich Geowissenschaften FU-Berlin, 173 S., 2002.

5. B. Steil, C. Brühl, E. Manzini, P.J. Crutzen, J. Lelieveld, P.J. Rasch, E. Roeckner and K. Krüger: A new interactive chemistry climate model. I: Present day climatology and interannual variability of the middle atmosphere using the model and 9 years of HALOE/UARS data, J. Geophys. Res. accepted 2003.

## 4.2 Fachberatung

Das Konzept der Fachberatung für die vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekte hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird im HLRN fortgeführt. Jedem vom Zulassungsausschuß empfohlenen Projekt ist ein Fachberater zugeordnet:

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
Allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Hans-Hermann Frese Wilhelm Vortisch
Chemie	Dr. Bernd Kallies
Bioinformatik	Dr. Thomas Steinke
Informatik	Michael Meyer (bis 12/02) Thomas Röblitz Florian Schintke u.a.
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)

Tabelle 4.3: Fachberater im ZIB

Die wichtigsten Aufgaben der Fachberater sind:

- Hilfe bei der Auswahl des geeigneten Rechners für gegebene Programme unter Berücksichtigung der Hochleistungsrechner im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) und 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.

Ein ganz wesentlicher Teil der Arbeiten im Berichtsjahr befaßte sich mit der Bereitstellung einer stabilen Benutzerumgebung des HLRN-Rechners einerseits und mit der Organisation des HLRN-Supports andererseits.

Einige lange bewährte Konzepte für die Benutzerumgebung (z.B. Modules-Konzept, Software-Distribution) wurden auch auf dem IBM-System implementiert. Die Basis der Benutzer-Dokumentation wurde vollständig auf die XML-basierte DocBook-DTD umgestellt.

Die Organisation des über die sechs beteiligten Länder verteilten, dezentralen HLRN-Supports beinhaltet auch die Bereitstellung der technischen Infrastruktur und Nutzung elektronischer Kommunikationsmittel wie z.B. ein web- und datenbank-basiertes Trouble-Ticket-System, welches sehr hilfreich insbesondere bei der Überwindung der Startschwierigkeiten auf dem IBM-System war.

Für alle Servicedienste wurde ein neuer Linux-Server in Betrieb genommen, die Dienste (Web, Dokumentation, Datenbanken, Trouble-Ticket-System, Mail, CVS etc.) werden sukzessive auf den Rechner übernommen.

Das ZIB koordiniert, unterstützt durch das RRZN in Hannover, den HLRN-Support und führt regelmäßige Treffen zur gegenseitigen Information und Ausbildung der norddeutschen Fachberater durch.

#### **4.2.1 Chemie und Bioinformatik**

Der Anteil der im Berichtszeitraum an Großprojekte aus dem Bereich Chemie abgegebenen Rechenzeit ist im Vergleich zum Vorjahr unverändert. Sowohl auf dem Parallelrechner Cray T3E als auch auf dem Vektorrechner Cray J90 betrug die abgegebene Rechenzeit ca. 40 % des jeweiligen Gesamtkontingentes.

Auf der Cray T3E wurden vorrangig die Codes *CPMD*, *VASP*, *TURBOMOLE* und *NW-Chem* eingesetzt. Die Cray J90 wurde ausschließlich von Nutzern des Paketes *Gaussian* verwendet.

Das zweite Quartal 2002 war durch die Außerbetriebnahme der Cray J90 und die Inbetriebnahme des IBM p690-Clusters (HLRN) gekennzeichnet. Durch die schnelle Portierung des Paketes *Gaussian* auf die p690-Plattform konnte ein reibungsloser Umzug der auf die Cray J90 angewiesenen Großprojekte gewährleistet werden. Bis zum Ende des Berichtszeitraums wurden alle auf der Cray T3E genutzten chemierelevanten

Softwarepakete auf dem HLRN bereitgestellt. Entsprechend den von der Nutzerschaft geäußerten Anforderungen wurde für den HLRN eine Lizenz des Programms *MOL-PRO* angeschafft sowie für biochemisch orientierte Nutzerkreise interessante Software (*NAMD*, *VMD*) portiert und bereitgestellt. Damit entspricht die Ausstattung des HLRN mit chemie- und bioinformatikrelevanter Software dem geplanten Stand. Neben der Portierung und Bereitstellung von Software fanden die Anforderungen von Nutzern aus dem Bereich Chemie Eingang in die Konfiguration der Hardware und systemnaher Softwarekomponenten des HLRN. Dies hat bereits im 3. und 4. Quartal 2002 zu einer weitgehenden Akzeptanz des HLRN durch die laufenden Chemiegroßprojekte und zur Beantragung von Kennungen durch bisher nicht am ZIB vertretene Nutzer aus dem norddeutschen Raum geführt. Im 4. Quartal 2002 betrug der Anteil der durch den HLRN-Komplex am ZIB an Nutzer aus dem Bereich Chemie abgegebenen Rechenzeit 80 % der Gesamtkapazität.

### **Berlin Center for Genome Based Bioinformatics (BCB)**

**Bearbeitet von:** Bernd Kallies

**Kooperationspartner:** BCB

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Der Fachberater ist wissenschaftlich in der Junior Research Group "Alignment and threading on massively parallel computers" des BCB engagiert. Sein Gebiet ist die Simulation der Faltung von Proteinen mit Methoden der Moleküldynamik. Dabei werden Trajektorien zwischen strukturell denaturierten und nativen Proteinstrukturen generiert und hinsichtlich der zeitlichen Abfolge von wesentlichen Faltungsereignissen und der Herausbildung von Sekundärstrukturelementen charakterisiert.

#### **4.2.2 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 auf dem Parallelrechner Cray T3E ebenfalls. Berücksichtigt man auch diejenigen Projekte, die über die NVV-Partnerkontingente am ZIB rechnen, so ist der Anteil der insgesamt abgenommenen Rechenzeit des Fachgebietes auf dem Parallelrechner mit etwa 28% im Vergleich zum Vorjahr gleich geblieben.

Der Vektorrechner wurde wegen der im Laufe des Jahres anstehenden Außerbetriebnahme der drei norddeutschen Cray Vektorrechner (am ZIB und am Rechenzentrum der Universität in Kiel) so stark durch klimawissenschaftliche Projekte in Anspruch genommen, daß die Betriebsphase der CRAY J90 im ZIB um ca. drei Monate verlängert werden mußte. Weitere Gründe für den späten Umstieg dieser Projekte auf den HLRN war die erst gegen Jahresende dort bereitstehende Möglichkeit des sicheren Backups

im größeren Umfang, der für die großen Datenmengen notwendig war, sowie die insgesamt instabile Produktionsumgebung.

Weitere typische Anwendungen aus dem Bereich der norddeutschen Küstenländer sind mit großen Projekten auf den HLRN-Rechner gekommen. Besonders erwähnenswert sind dabei das Institut für Ostseeforschung Warnemünde und das Alfred-Wegener-Institut in Bremerhaven.

### 4.2.3 Ingenieurwissenschaften

Die Anzahl der aktiven Großprojekte ist im Berichtszeitraum mit 14 gleich geblieben, ebenso der Anteil der auf dem Parallelrechner Cray T3E abgenommenen Rechenzeit.

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

Einige wichtige Nutzergruppen haben den Umstieg auf den HLRN-Rechner noch nicht vollzogen, da dort gute und stabile Produktionsbedingungen für eine zügige Portierung der Codes und Projekte nicht gegeben waren und massiv-parallele Anwendungen mit ihren für CFD-Codes typischen feingranularen Kommunikationsmustern solange auf dem T3E effizienter bedient werden, bis der HLRN mit der endgültigen Netzwerkkonfiguration ausgestattet ist. Außerdem setzen einige der Projekte weiter und verstärkt auf PC-Cluster.

Viele Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich arbeiten mit kommerziellen Paketen wie *ABAQUS*, das für die typischen Problemgrößen eine gute Performance auf dem HLRN-Rechner zeigt. Die Nutzung von *ABAQUS* hat auch in diesem Berichtszeitraum weiter zugenommen, und es kommt trotz der deutlich verbesserten Leistung immer wieder zu Engpässen bei der Anzahl der verfügbaren Lizenzen.

Aus Fachberatungssicht war das Berichtsjahr geprägt durch Installation und Inbetriebnahme des HLRN-Rechners und das Anlaufen des HLRN-Verbundes. Schwerpunkt der Arbeiten waren die Koordination des norddeutschlandweiten HLRN Supports, Konzeption und Bereitstellung der technischen und organisatorischen Infrastruktur (z.B. Trouble-Ticket-System), Dokumentationssystem einschließlich der notwendigen Webserver, HLRN-spezifische Software-Installation und -Dokumentation sowie Konzeption und Bereitstellung der Benutzerumgebung. Diese Arbeiten dauern noch an.

### 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

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*<sup>2</sup> und Teilprojektleiter im DFG-Graduiertenkolleg 827 *Transportvorgänge an bewegten Phasengrenzflächen*<sup>3</sup>, die beide an der TUB angesiedelt sind.

Daneben gilt das Interesse der Unterstützung der Großprojekte durch Nutzbarmachung neuerer Methoden und Konzepte wie z.B. die interaktive, netzverteilte Simulation (Simulation Steering) und Visualisierung. Im Ausbildungsbereich werden Kurse (MPI-Kurs, auch bei den NVV-Partnern) und Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel Computing*) vom Fachberater aus dem Bereich der Ingenieurwissenschaft durchgeführt.

### 4.2.4 Physik

Auf der CRAY T3E ist der von Physikprojekten in Anspruch genommene Anteil der abgegebenen Rechenzeit mit etwa 30% gegenüber dem Vorjahr unverändert geblieben. In diesem Jahr ist die Fachberatung geprägt durch die Installation des HLRN-Rechners, die insbesondere folgende Arbeiten erforderte: Schreiben von Benutzerdokumentation, Programmportierung und -optimierung. Für massiv parallele Programme liegt die erzielbare Dauer-Rechenleistung des neuen IBM-Systems, selbst bei sorgfältiger Programmoptimierung, oftmals unter dem auf der CRAY T3E erzielten Effizienz von ca. 10%. Ursächlich ist dafür u. a. die Kommunikationsleistung des zunächst gelieferten internen Netzwerkes (Colony-Netz), die nicht im gleichen Maße wie die Prozessorleistung gegenüber der CRAY T3E gesteigert wurde. Im Jahr 2003 wird das Colony-Netzwerk durch ein leistungsfähigeres Netzwerk ersetzt.

Weitere Aktivitäten des Fachberaters waren: Ausbildung (zwei Kurse "Einführung in die Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP"), Bearbeitung des Grid-Projekts UNICORE-Plus, Mitarbeit im Telekommunikationsprojekt MOMENTUM (Abt. Optimierung, siehe S. 94) sowie Beteiligung an der Forschung in der Gitterfeldtheorie.

### Gitterfeldtheorie

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben

**Kooperationspartner:** Volkard Linke (Freie Universität Berlin); Ernst-Michael Ilgenfritz, Werner Kerler, Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin); Ger-

---

<sup>2</sup><http://www.tu-berlin.de/fst/>

<sup>3</sup><http://www.tu-berlin.de/fst/grk827/>

rit 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.

Wichtigste Aktivität in diesem Jahr war die Betreuung einer Diplomarbeit zur sogenannten Aoki-Phase in der Gitter-QCD gemeinsam mit Michael Müller-Preußker.

## 4.3 Weitverkehrsnetze

### 4.3.1 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

**Bearbeitet von:** Hubert Busch, Renate Weidinger

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

Berlin gilt zusammen mit seinem Umland als die größte Wissenschaftsregion Deutschlands. Hier sind außerordentlich viele renommierte Wissenschaftseinrichtungen angesiedelt: fünf Universitäten, zwölf Fachhochschulen und über 100 weitere außeruniversitäre Forschungseinrichtungen. Alle großen wissenschaftlichen Gesellschaften (Max-Planck-Gesellschaft, Fraunhofer-Gesellschaft, Helmholtz-Gesellschaft, Leibniz-Gesellschaft) sind in der Region Berlin/Potsdam mit hochrangigen Forschungsinstituten vertreten. Das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN (Berlin Research Area Information Network) verbindet diese Wissenschaftseinrichtungen - und darüber hinaus zahlreiche kulturelle Einrichtungen in der Stadt - und stellt für die meisten von ihnen auch den Anschluß an das Internet her.

Von der Funktion her gesehen ist BRAIN ein selbständiges Netz; netztopologisch ist es jedoch ein Teil des vom Landesbetrieb für Informationstechnik (LIT) betriebenen Berliner MAN (Metropolitan Area Network), dem Lichtwellenleiter-Netz der Berliner Verwaltung. Auf den Kabelstrecken des Kernnetzes und auf einigen weiteren Stich- und Verbindungsstrecken des MAN ist eine bestimmte Anzahl von LWL-Fasern für BRAIN reserviert.

Durch den Anschluss neuer Standorte konnte das Netz im Berichtsjahr um weitere 25 km erweitert werden. Neu an das LWL-Netz angeschlossen wurden vor allem mehrere Standorte der Stiftung Preußischer Kulturbesitz (SPK):

- drei Standorte der Staatsbibliothek Preußischer Kulturbesitz
- mehrere Museumsstandorte in Dahlem sowie das Geheime Staatsarchiv
- die Museen in Charlottenburg (Museum für Vor- und Frühgeschichte, Ägyptisches Museum u.a.)

- die gesamte Museumsinsel
- das Bildarchiv der SPK am Märkischen Ufer
- die Hauptverwaltung der SPK.

Außerdem wurde ein weiterer Standort für die Fachhochschule für Technik und Wirtschaft (FHTW) am Ostkreuz und der Humboldt-Universität zu Berlin (HUB) am Sportforum Hohenschönhausen an das LWL-Netz angebunden. Damit sind insgesamt 67 Standorte an BRAIN angeschlossen.

#### 4.3.2 BRAIN-Dienste

**Bearbeitet von:** Hubert Busch, Renate Weidinger, Marek Fröhlich

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

BRAIN bietet den wissenschaftlichen Einrichtungen neben dem Anschluß an das G-WiN (G-WiN-Datenverkehr über BRAIN-Leitungen) des Deutschen Forschungsnetzes (DFN) die Möglichkeit, den lokalen Datenverkehr der in Berlin verteilten Standorte direkt durchzuführen.

Separate VLANs (Virtual Local Area Network) für jede Einrichtung verbinden die Einzelstandorte miteinander und separieren den Datenverkehr der Einrichtungen voneinander. Die Konfiguration der einzelnen VLANs wird vom BRAIN-Netzmanagement koordiniert und von den jeweiligen Administratoren der Netzknotenstandorte durchgeführt. Durch Einsatz von VLANs können die Einrichtungen ihre angebotenen Standorte in einem lokalen, von der jeweiligen Einrichtung administrierten Netz zusammenführen.

Als weiteren Dienst bietet BRAIN seinen Nutzern einen Zugang zum Berliner Verwaltungsnetz. Im Probelauf ist dieser Zugang zunächst nur für die drei Universitäten und das ZIB geschaltet, danach wird er jedoch den Verwaltungen aller Berliner Wissenschaftseinrichtungen auf Wunsch zur Verfügung stehen. Nach einer Vereinbarung zwischen ZIB und dem LIT werden die Zugriffe auf das Netz der Berliner Verwaltung zentral über BRAIN laufen und von der BRAIN-Geschäftsstelle koordiniert.

Damit BRAIN den gestiegenen Anforderungen der nutzenden Einrichtungen auch in Zukunft gerecht werden kann, sind Modernisierung und Ausbau des vorhandenen Netzes unter einer zentralen Netzadministration notwendig. Der Backbone des künftigen BRAIN-Verbundnetzes wird ringförmig angelegt und verbindet acht in Berlin verteilte Netzknoten miteinander (siehe Abbildung 4.10).

Durch die Ring-Struktur ist eine hohe Ausfallsicherheit des Backbones gegen Leitungsschäden gewährleistet. Es wird zusätzlich eine Backup-Funktionalität für den G-WiN-Zugang der BRAIN-Teilnehmer angestrebt. Bei einer Störung des G-WiN-Zugangs wird der G-WiN-Verkehr der betroffenen Einrichtung über den BRAIN-

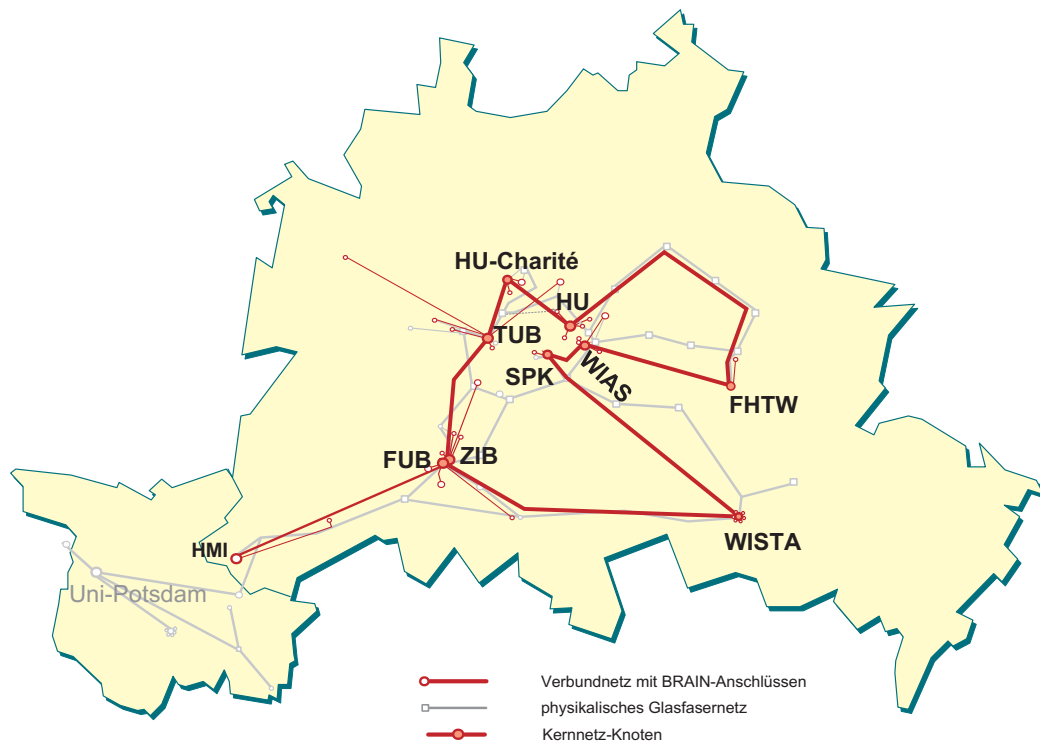


ABBILDUNG 4.10: Geplantes Verbundnetz (mit Kernnetz)

Backbone zu einem benachbarten DFN-Teilnehmer geleitet, bis die Störung behoben ist. Damit wird auch die Internet-Anbindung der BRAIN-Teilnehmer ausfallsicherer als bisher.

### 4.3.3 HLRN-Link Berlin-Hannover

Eine wichtige Komponente des in Berlin und Hannover verteilt betriebenen HLRN-Systems (vgl. Kapitel 4.1.1) ist die dediziert genutzte Datenleitung zwischen den beiden Betreibern ZIB und RRZN. Technisch handelt es sich bei dieser Verbindung um einen beim DFN-Verein gemieteten und von der Deutschen Telekom bereitgestellten “transparenten WDM-Kanal” im G-WiN mit einer Übertragungsbandbreite von maximal 2,5 Gbit/s.

Hierbei stellt die Deutsche Telekom keine Netzverbindung mit einer definierten Bandbreite und einem definierten Protokoll, sondern ungetaktet eine spezielle Wellenlänge (WDM: Wave Division Multiplexing) auf einer Glasfaser zur Nutzung bereit. Taktgeber für diese Fernstrecke und gleichzeitig Endpunkte der Strecke sind je ein SingleMode-MultiMode-Umsetzer, die vom ZIB bzw. vom RRZN betrieben werden.

Auf der nächst höheren Protokollschicht wird Gigabit-Ethernet mit der Eigenschaft

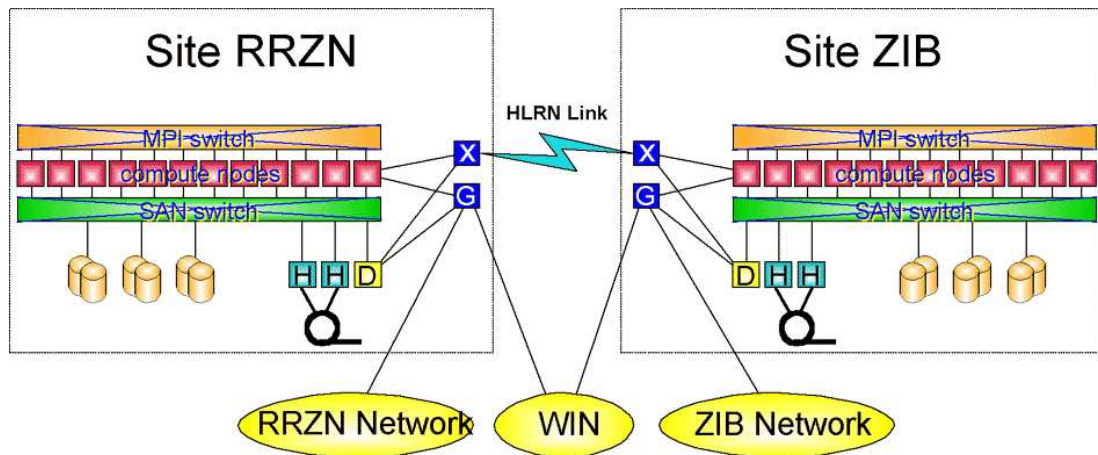


ABBILDUNG 4.11: Einbindung des HLRN-Links in das HLRN-Gesamtsystem

des Transfers von Jumbo-Frames (Erhöhung der Standard-Paketgröße von 1518 Byte auf 9018 Byte) eingesetzt. Mit dem Einsatz von Gigabit-Ethernet kann derzeit die volle Übertragungsbandbreite von 2,4 Gbit/s nicht ausgenutzt werden, Gigabit-Ethernet überträgt mit 1 Gbit/s.

Auf dem HLRN-Link werden folgende Leistungen erbracht: Die Round-Trip-Zeiten von IP-Paketen liegen bei etwa 4,5 ms (Millisekunden), das ist ein erfreulicher Wert. Üblicherweise rechnet man die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts in einer Glasfaser mit 200 km/ms, damit beträgt die Round-Trip-Zeit des Lichtimpulses dieser 315 km langen Strecke etwa 3,15 ms, die übrige Verzögerung von ca. 1,35 ms ist durch die Verarbeitung in den Rechnern und in den Ethernet-Switches bedingt. Die zunächst gemessenen Bandbreiten hingegen waren mit 285 Mbit/s enttäuschend. Durch spezielle Erweiterungen des Ethernet- Standards (Jumbo-Frames) und spezielle Übertragungsprotokolle (Scheduled Transfer, STP) lassen sich jedoch erheblich bessere Werte und sogar fast die theoretisch mögliche Transferrate von 991 Mbit/s erreichen.

Diese WDM-Verbindung zwischen ZIB und RRZN ist seit August 2001 im Rahmen eines vom DFN-Verein mit Mitteln des BMBF geförderten gemeinsamen Entwicklungsprojekts von ZIB und RRZN in Betrieb. Durch die im Rahmen dieses Projekts gewonnenen Erfahrungen konnte umgehend mit Inbetriebnahme des HLRN-Systems auch der HLRN-Link in Betrieb genommen werden.

Sämtliche Knoten des Systems einschließlich der Vorrechner (siehe Abbildung 4.11) bilden über diese Verbindung ein gemeinsames IP-Subnetz. Die lokal in Berlin und Hannover verfügbaren Heimat-Dateiverzeichnisse (/home) wurden zunächst über NFS-Dienste und werden derzeit über GeoRM-Dienste auf der jeweils anderen Seite bereitgestellt. Sehr große Dateien des Dateisystems /perm – hier werden Dateien

regelmäßig auf Magnetbänder des automatischen Magnetbandarchivs ausgelagert – können vom Benutzer selbst mit vom ZIB bereitgestellten sicheren (SSH-Dienste) jedoch effektiven Kopier Routinen übertragen werden.

Im Rahmen einer weiteren Kooperation mit dem DFN-Verein werden im Jahr 2003 Untersuchungen über

- die verbesserte Ausnutzung des HLRN-Links,
- ein gemeinsames I/O-System in SAN-Technik,
- die Kopplung von parallelen Programmen und
- ein gemeinsames Ressourcen-Management-System

durchgeführt, deren Ergebnisse dem allgemeinen Benutzerbetrieb des HLRN-Systems zugute kommen werden.

## 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 02-01.** Thorsten Hohage; Frank Schmidt; Lin Zschiedrich. *A new method for the solution of scattering problems.*

**Abstract:** We present a new efficient algorithm for the solution of direct time-harmonic scattering problems based on the Laplace transform. This method does not rely on an explicit knowledge of a Green function or a series representation of the solution, and it can be used for the solution of problems with radially symmetric potentials and problems with waveguides. The starting point is an alternative characterization of outgoing waves called *pole condition*, which is equivalent to Sommerfeld’s radiation condition for problems with radially symmetric potentials. We obtain a new representation formula, which can be used for a numerical evaluation of the exterior field in a postprocessing step. Based on previous theoretical studies, we discuss the numerical realization of our algorithm and compare its performance to the PML method.

**ZIB–Report 02-02.** Julian Pfeifle; Jörg Rambau. *Computing Triangulations Using Oriented Matroids.*

**Abstract:** Oriented matroids are combinatorial structures that encode the combinatorics of point configurations. The set of all triangulations of a point configuration depends only on its oriented matroid. We survey the most important ingredients necessary to exploit oriented matroids as a data structure for computing all triangulations of a point configuration, and report on experience with an implementation of these concepts in the software package TOPCOM. Next, we briefly overview the construction and an application of the secondary polytope

of a point configuration, and calculate some examples illustrating how our tools were integrated into the POLYMAKE framework.

**ZIB–Report 02-03.** Annegret K. Wagler. *Relaxing Perfectness: Which Graphs are ‘Almost’ Perfect?*

**Abstract:** For all perfect graphs, the stable set polytope  $\text{STAB}(G)$  coincides with the fractional stable set polytope  $\text{QSTAB}(G)$ , whereas  $\text{STAB}(G) \subset \text{QSTAB}(G)$  holds iff  $G$  is imperfect. Padberg asked in the early seventies for “almost” perfect graphs. He characterized those graphs for which the difference between  $\text{STAB}(G)$  and  $\text{QSTAB}(G)$  is smallest possible. We develop this idea further and define three polytopes between  $\text{STAB}(G)$  and  $\text{QSTAB}(G)$  by allowing certain sets of cutting planes only to cut off all the fractional vertices of  $\text{QSTAB}(G)$ . The difference between  $\text{QSTAB}(G)$  and the largest of the three polytopes coinciding with  $\text{STAB}(G)$  gives some information on the stage of imperfectness of the graph  $G$ . We obtain a nested collection of three superclasses of perfect graphs and survey which graphs are known to belong to one of those three superclasses. This answers the question: which graphs are “almost” perfect?

**ZIB–Report 02-04.** Thorsten Hohage; Frank Schmidt. *On the Numerical Solution of Nonlinear Schrödinger Type Equations in Fiber Optics.*

**Abstract:** The aim of this paper is to develop fast methods for the solution of nonlinear Schrödinger type equations in fiber optics. Using the method of lines we have to solve a stiff system of ordinary differential equations where the eigenvalues of the Jacobian are close to the imaginary axis. This is usually done by a Split Step method. Here we consider the extrapolation of Split Step methods with adaptive order and step size control. For more complicated nonlinearities, in particular stimulated Raman scattering, Split Step methods are less efficient since symmetry is either destroyed or requires much additional effort. In this case we use implicit Runge Kutta formulas of Gauß type. The key point for the efficient implementation of these methods is that the system of nonlinear algebraic equations can be solved without setting up the Jacobian. The proposed methods are compared to other methods, in particular exponential integrators, the method of Marcuse, and the method of Blow and Wood.

**ZIB–Report 02-05.** Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Probieren geht über Studieren? Entscheidungshilfen für kombinatorische Online-Optimierungsprobleme in der innerbetrieblichen Logistik.*

**Zusammenfassung:** Die Automatisierung von innerbetrieblicher Logistik erfordert – über die physikalische Steuerung von Geräten hinaus – auch eine effiziente Organisation der Transporte: ein Aufgabenfeld der kombinatorischen Optimierung. Dieser Artikel illustriert anhand von konkreten Aufgabenstellungen die Online-Problematik (unvollständiges Wissen) sowie die Echtzeit-Problematik (beschränkte Rechenzeit), auf die man in der innerbetrieblichen Logistik trifft. Der Text gibt einen Überblick über allgemeine Konstruktionsprinzipien für Online-Algorithmen und Bewertungsmethoden, die bei der Entscheidung hel-



fen, welche Algorithmen für eine vorliegende Problemstellung geeignet sind.

**ZIB-Report 02-06.** Alexander Reinefeld; Hinnerk Stüben; Florian Schintke; George Din. *GuiGen: A Toolset for Creating Customized Interfaces for Grid User Communities.*

Appeared in: Future Generation Computer Systems 18 (2002) 1075-1084

**Abstract:** *GuiGen* is a comprehensive set of tools for creating customized graphical user interfaces (GUIs). It draws from the concept of computing portals, which are here seen as interfaces to application-specific computing services for user communities. While *GuiGen* was originally designed for the use in computational grids, it can be used in client/server environments as well.

Compared to other GUI generators, *GuiGen* is more versatile and more portable. It can be employed in many different application domains and on different target platforms. With *GuiGen*, application experts (rather than computer scientists) are able to create their own individually tailored GUIs.

**ZIB-Report 02-07.** Annegret K. Wagler. *Antiwebs are Rank-Perfect.*

**Abstract:** We discuss a nested collection of three superclasses of perfect graphs: near-perfect, rank-perfect, and weakly rank-perfect graphs. For that, we start with the description of the stable set polytope for perfect graphs and allow stepwise more general facets for the stable set polytopes of the graphs in each superclass. Membership in those three classes indicates how far a graph is away from being perfect. We investigate for webs and antiwebs to which of the three classes they belong. We provide a complete description of the facets of the stable set polytope for antiwebs (with help of a result due to Shepherd on near-bipartite graphs). The main result is that antiwebs are rankperfect.

**ZIB-Report 02-08.** Thomas Wolf. *The integration of systems of linear PDEs using conservation laws of syzygies.*

**Abstract:** The purpose of the paper is to formulate and use syzygies for systems of linear PDEs. The computation of an equivalent of a GCD for linear partial differential operators will save us their factorization which is otherwise only possible algorithmically in special cases.

After showing the computation with the new and the traditional method and comparing both in the next three sections, the algorithm is explained in general and an overview is given.

**ZIB-Report 02-09.** Andreas Eisenblätter; Martin Grötschel; Arie M. C. A. Koster. *Frequenzplanung im Mobilfunk.*

Erschienen in: DMV-Mitteilungen 1 (2002) S. 18-25

**Zusammenfassung:** Telekommunikation ist seit Jahren „in“. Zunächst gab es einen enormen Aufschwung; neue Technologien und Dienste haben eine überwältigende, nicht vorhersehbare Akzeptanz gefunden. Derzeit ist – ausgelöst durch die UMTS-Lizenzversteigerungen, Rezessions- und Sättigungstendenzen – eine Krise zu verzeichnen. Viele (auch wir) sind da-

von überzeugt, dass technischer Fortschritt und nützliche Dienste demnächst die Stimmung wieder ändern werden. Wenigen ist allerdings bewusst, welche Rolle Mathematik bei der Entwicklung und dem effizienten Einsatz vieler der neuen Kommunikationstechnologien spielt. In diesem Artikel soll kein Überblick über diesen umfangreichen Themenkreis gegeben werden. Wir zeigen lediglich an einem konkreten Beispiel aus dem Mobilfunk, der Frequenzplanung in GSM-Funknetzen, was man durch geeignete Modellierung der praktischen Fragestellung und den Einsatz problemadäquater Algorithmen erreichen kann.

**ZIB-Report 02-10.** Ralf Borndörfer; Andreas Löbel; Steffen Weider. *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Nahverkehr.*

Erschienen in: Heureka '02: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Strassen- und Verkehrswesen, Köln (2002), 77-98

**Zusammenfassung:** Wir beschreiben einen Ansatz zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr. Der Ansatz zielt auf die Verbesserung des Gesamtwirkungsgrades dieser beiden Planungsschritte und auf die besondere Planungsproblematik im Regionalverkehr. Wir entwickeln dazu mathematische Optimierungstechniken für den Einsatz in den Planungssystemen MICROBUS II und DIVA.

**ZIB-Report 02-11.** Stefan Hougardy; Annegret Wagler. *Perfectness is an Elusive Graph Property.*

**Abstract:** A graph property is called elusive (or evasive) if every algorithm for testing this property has to read in the worst case  $\binom{n}{2}$  entries of the adjacency matrix of the given graph. Several graph properties have been shown to be elusive, e.g. planarity (Best et al) or  $k$ -colorability (Bollobas). A famous conjecture of Karp says that every non-trivial monotone graph property is elusive. We prove that a non-monotone but hereditary graph property is elusive: perfectness.

**ZIB-Report 02-12.** Marcus Weber; Tobias Galliat. *Characterization of Transition States in Conformational Dynamics using Fuzzy Sets.*

**Abstract:** Recently, a novel approach for the analysis of molecular dynamics on the basis of a transfer operator has been introduced. Therein conformations are considered to be disjoint metastable clusters within position space of a molecule. These clusters are defined by almost invariant characteristic functions that can be computed via *Perron Cluster* analysis.

The present paper suggests to replace crisp clusters with *fuzzy* clusters, i.e. to replace characteristic functions with membership functions. This allows a more sufficient characterization of transition states between different conformations and therefore leads to a better understanding of molecular dynamics. Furthermore, an indicator for the uniqueness of metastable fuzzy clusters and a fast algorithm for the computation of these clusters are described. Numerical examples are included.

**ZIB–Report 02-13.** Martin Weiser. *Linear convergence of an interior point method for linear control constrained optimal control problems.*

**Abstract:** The paper provides a detailed analysis of a short step interior point algorithm applied to linear control constrained optimal control problems. Using an affine invariant local norm and an inexact Newton corrector, the well-known convergence results from finite dimensional linear programming can be extended to the infinite dimensional setting of optimal control.

The present work complements a recent paper of Weiser and Deuffhard, where convergence rates have not been derived.

The choice of free parameters, i.e. the corrector accuracy and the number of corrector steps, is discussed.

**ZIB–Report 02-14.** Peter Deuffhard. *Adaptive Pseudo–transient Continuation for Nonlinear Steady State Problems.*

**Abstract:** Pseudo–transient continuation methods are quite popular for the numerical solution of steady state problems, typically in PDEs. They are based on an embedding into a time dependent initial value problem. In the presence of dynamical invariants the Jacobian matrix of the nonlinear equation system is bound to be singular. The paper presents a convergence analysis which takes this property into account – in contrast to known approaches. On the basis of the new analysis adaptive algorithms are suggested in detail. These include a variant with Jacobian approximations as well as inexact pseudo–transient continuation, both of which play an important role in discretized PDEs. Numerical experiments are left to future work.

**ZIB–Report 02-15.** Martin Grötschel; Martin Henk. *On the Representation of Polyhedra by Polynomial Inequalities.*

**Abstract:** A beautiful result of Bröcker and Scheiderer on the stability index of basic closed semi-algebraic sets implies, as a very special case, that every  $d$ -dimensional polyhedron admits a representation as the set of solutions of at most  $d(d+1)/2$  polynomial inequalities. Even in this polyhedral case, however, no constructive proof is known, even if the quadratic upper bound is replaced by any bound depending only on the dimension.

Here we give, for simple polytopes, an explicit construction of polynomials describing such a polytope. The number of used polynomials is exponential in the dimension, but in the 2- and 3-dimensional case we get the expected number  $d(d+1)/2$ .

**ZIB–Report 02-16.** Andreas Eisenblätter; Armin Fügenschuh; Thorsten Koch; Arie Koster; Alexander Martin; Tobias Pfender; Oliver Wegel; Roland Wessäly. *Modelling Feasible Network Configurations for UMTS.*

Appeared in: Telecommunications Network Design and Management. G. Anandalingam, S. Raghavan (eds.) Boston: Kluwer Academic Publ. 2002. ISBN 1-4020-7318-6

**Abstract:** A model for the optimisation of the location and configuration of

base stations in a UMTS network is described. The focus is primarily on modelling the configuration problem sufficiently accurate using mixed-integer variables and (essentially) linear constraints. These constraints reflect the limited downlink code capacity in each cell, the interference limitations for successful up- and downlink transmissions, the need for sufficiently strong (cell) pilot signals, and the potential gain for mobiles from being in soft(er) hand-over. It is also explained how to use the model as a basis for rating network configurations.

**ZIB-Report 02-17.** Jörg Rambau. *TOPCOM: Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids.*

**Abstract:** TOPCOM is a package for computing triangulations of point configurations and oriented matroids. For example, for a point configuration one can compute the chirotope, components of the flip graph of triangulations, enumerate all triangulations. The core algorithms implemented in TOPCOM are described, and implementation issues are discussed.

**ZIB-Report 02-18.** Martin Grötschel; Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Luis M. Torres. *Making the Yellow Angels Fly: Online Dispatching Of Service Vehicles in Real-Time.*

**Abstract:** Combinatorial online optimization is an area with lots of applications and potential for significant progress, both in theory and practice. In this short note we sketch the ADACproblem, a typical large-scale online optimization problem, discuss some theoretical and practical issues coming up, and explain, very briefly, how we approach this problem mathematically. Online problems are a battlefield of heuristics with many strong claims about their solution quality. We indicate that a stronger problem orientation and the use of a little more mathematics may yield.

(Appeared in: SIAM News, Vol. 35, No. 4, (2002))

**ZIB-Report 02-19.** Martin Grötschel. *Cardinality Homogeneous Set Systems, Cycles in Matroids, and Associated Polytopes.*

**Abstract:** A subset  $\mathcal{C}$  of the power set of a finite set  $E$  is called cardinality homogeneous if, whenever  $\mathcal{C}$  contains some set  $F$ ,  $\mathcal{C}$  contains all subsets of  $E$  of cardinality  $|F|$ . Examples of such set systems  $\mathcal{C}$  are the sets of circuits and the sets of cycles of uniform matroids and the sets of all even or of all odd cardinality subsets of  $E$ . With each cardinality homogeneous set system  $\mathcal{C}$ , we associate the polytope  $P(\mathcal{C})$ , the convex hull of the incidence vectors of all sets in  $\mathcal{C}$ , and provide a complete and nonredundant linear description of  $P(\mathcal{C})$ . We show that a greedy algorithm optimizes any linear function over  $P(\mathcal{C})$ , give an explicit optimum solution of the dual linear program, and provide a polynomial time separation algorithm for the class of polytopes of type  $P(\mathcal{C})$ .

**ZIB-Report 02-20.** Peter Deuffhard. *From Molecular Dynamics to Conformational Dynamics in Drug Design.*

**Abstract:** Computational drug design studies molecular recognition in the *vir-*

*tual lab*. The arising Hamiltonian dynamics is known to be chaotic and ill-conditioned already after picoseconds, whereas times are *msec* up to *min*. Classical molecular dynamics with long term trajectory computation gives, at best, information about time and statistical ensemble averages. The present paper surveys a recent new modeling approach called *conformational dynamics*, which is due to the author and Ch. Schütte. This approach achieves information about the dy time scales by telescoping a short term deterministic model with a statistical model. Examples of small biomolecules are included.

**ZIB-Report 02-21.** Stefan Litsche; Dagmar Otto. *Evaluation ausgewählter Portal-systeme*.

**Zusammenfassung:** Die Bibliotheken des KOBV haben im Jahr 2001 die Entwicklung der KOBV-Suchmaschine zu einem gemeinsamen Informationsportal Berlin-Brandenburg und den Aufbau lokaler Bibliotheksportale als Hauptentwicklungsziele des KOBV definiert. Diese Informationsportale sollen mit Standardsoftware realisiert werden. Um die Auswahl eines Systems zu unterstützen, wurde in der Zentrale des KOBV ausgewählte Systeme untersucht.

In der Arbeit werden zahlreiche Kriterien vorgestellt, auf Grund derer die betreffenden Systeme beurteilt werden. Die Kriterien umfassen sowohl Aspekte aus der Sicht der Benutzer als auch Kriterien aus der Sicht der Betreiber eines solchen Systems. Wesentliche Funktionen und die Realisierung von verschiedenen Merkmalen werden im Bericht ausführlich beschrieben. Daneben liefert eine Tabelle mit allen betrachteten Kriterien eine Übersicht über vorhandene Merkmale und der Art der Realisierung.

**ZIB-Report 02-22.** Sven O. Krumke; Diana Poensgen. *Online Call Admission in Optical Networks with Larger Wavelength Demands*.

**Abstract:** In the problem of *Online Call Admission in Optical Networks*, briefly called OCA, we are given a graph  $G = (V, E)$  together with a set of wavelengths  $W$  and a finite sequence  $\sigma = r_1, r_2, \dots$  of calls which arrive in an online fashion. Each call  $r_j$  specifies a pair of nodes to be connected and an integral demand indicating the number of required lightpaths. A lightpath is a path in  $G$  together with a wavelength  $\lambda \in W$ .

Upon arrival of a call, an online algorithm must decide immediately and irrevocably whether to accept or to reject the call without any knowledge of calls which appear later in the sequence. If the call is accepted, the algorithm must provide the requested number of lightpaths to connect the specified nodes. The essential restriction is the wavelength conflict constraint: each wavelength is available only once per edge, which implies that two lightpaths sharing an edge must have different wavelengths. Each accepted call contributes a benefit equal to its demand to the overall profit. The objective in OCA is to maximize the overall profit.

Competitive algorithms for OCA have been known for the special case where every call requests just a single lightpath. In this paper we present the first com-

petitive online algorithms for the general case of larger demands.

**ZIB–Report 02-23.** Sven O. Krumke; Maarten Lipman; Willem de Paepe; Diana Poensgen; Jörg Rambau; Leen Stougie; Gerhard J. Woeginger. *How to Cut a Cake Almost Fairly*.

**Abstract:** In the cake cutting problem,  $n \geq 2$  players want to cut a cake into  $n$  pieces so that every player gets a “fair” share of the cake by his own measure. We describe a protocol with  $n - 1$  cuts in which each player can enforce to get a share of at least  $1/(2n - 2)$ . Moreover we show that no protocol with  $n - 1$  cuts can guarantee a better fraction.

**ZIB–Report 02-24.** Sven O. Krumke; Madhav V. Marathe; Diana Poensgen; Sekharipuram S. Ravi; Hans-Christoph Wirth. *Budgeted Maximal Graph Coverage*.

**Abstract:** An instance of the *maximum coverage* problem is given by a set of weighted ground elements and a cost weighted family of subsets of the ground element set. The goal is to select a subfamily of total cost of at most that of a given budget maximizing the weight of the covered elements.

We formulate the problem on graphs: In this situation the set of ground elements is specified by the nodes of a graph, while the family of covering sets is restricted to connected subgraphs. We show that on general graphs the problem is polynomial time solvable if restricted to sets of size at most 2, but becomes NP-hard if sets of size 3 are permitted. On trees, we prove polynomial time solvability if each node appears in a fixed number of sets. In contrast, if vertices are allowed to appear an unbounded number of times, the problem is NP-hard even on stars. We finally give polynomial time algorithms for special cases where the subgraphs form paths and the host graph is a line, a cycle or a star.

**ZIB–Report 02-25.** Sven O. Krumke. *Online Optimization: Competitive Analysis and Beyond*.

**Abstract:** Traditional optimization techniques assume, in general, knowledge of all data of a problem instance. There are many cases in practice, however, where decisions have to be made before complete information about the data is available. In fact, it may be necessary to produce a part of the problem solution as soon as a new piece of information becomes known. This is called an *online situation*, and an algorithm is termed *online*, if it makes a decision (computes a partial solution) whenever a new piece of data requests an action.

*Competitive analysis* has become a standard yardstick to measure the quality of online algorithms. One compares the solution produced by an online algorithm to that of an optimal (clairvoyant) offline algorithm. An online algorithm is called  $c$ -competitive if on every input the solution it produces has “cost” at most  $c$  times that of the optimal offline algorithm. This situation can be imagined as a game between an online player and a malicious adversary.

Although competitive analysis is a worst-case analysis and henceforth pessimistic, it often allows important insights into the problem structure. One can obtain an idea about what kind of strategies are promising for real-world systems and

why. On the other hand there are also cases where the offline adversary is simply too powerful and allows only trivial competitiveness results. This phenomenon is called “hitting the triviality barrier”.

We investigate several online problems by means of competitive analysis. We also introduce new concepts to overcome the weaknesses of the standard approach and to go beyond the triviality barrier.

**ZIB–Report 02-26.** Grötschel; Martin.  $P = NP?$

Erschienen in: Elemente der Mathematik, Vol. 57, Nr. 3 (2002) 96-102

**Zusammenfassung:** Hinter der für den Uneingeweihten etwas kryptischen Frage „ $P = NP?$ “ verbirgt sich das derzeit wichtigste Problem der Komplexitätstheorie. Dieser Artikel erläutert einige Aspekte der Theorie und erklärt informell, was „ $P = NP?$ “ bedeutet. Es geht nicht nur um komplizierte algorithmische Mathematik und Informatik, sondern um grundsätzliche Fragen unserer Lebensumwelt. Kann man vielleicht beweisen, daß es für viele Probleme unseres Alltags keine effizienten Lösungsmethoden gibt?

**ZIB–Report 02-27.** Beate Rusch. *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg.*

Appeared in: The Proceedings of Digital Library - IT Opportunities and Challenges in the New Millennium. Sun Jiazheng (ed.) Beijing, 2002, pp. 702-709

**Abstract:** The Cooperative Library Network Berlin-Brandenburg (KOBV) has set the development of a genuine library information portal for the two German Lander (federal states) Berlin and Brandenburg as its main task for the next years. This joined effort is driven by the vision of an user friendly Internet information portal which is accessible anytime, from anywhere in the world. The idea of a regional information portal can be understood as the logically consistent development of the basic ideas of the KOBV. Starting in 1997, the consortia has set the implementation of a virtual OPAC instead of a physical union catalogue as its goal. The result was the KOBV-Search Engine which already has some qualities of a portal itself.

The paper begins with initial remarks about the German library world, which do form the background for the project and its initiator - the KOBV consortia. After this preliminary part, different types of portals are introduced. The basic features of the KOBV-Search Engine as one of the cornerstones of the future portal are discussed in the following. The information portal will be much richer in content and services for the end-user. Two aspects are focused on in more detail: the presentation of resources, which becomes a compelling requirement because of the broader range of content and the personalization of services, as one important feature to suit user’s individual needs.

**ZIB–Report 02-28.** Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On the Two-Class M/M/1 System under Preemptive Resume and Impatience of the Prioritized Customers.*

**Abstract:** The paper deals with the two-class priority M/M/1 system, where the prioritized class-1 customers are served under FCFS preemptive resume disci-

pline and may become impatient during their waiting for service with generally distributed maximal waiting times but finite expectation. The class-2 customers have no impatience. The required mean service times may depend on the class of the customer. As the dynamics of class-1 customers are related to the well analyzed M/M/1+GI system, our aim is to derive characteristics for class-2 customers and for the whole system. The solution of the balance equations for the partial probability generating functions of the detailed system state process is given in terms of the weak solution of a family of boundary value problems for ordinary differential equations. By means of this solution formulae for the joint occupancy distribution and for the sojourn and waiting times of class-2 customers are derived generalizing results recently obtained by Choi et al. in case of deterministic maximal waiting times. For deterministic maximal waiting times partially new explicit formulae are given.

**ZIB-Report 02-29.** Illia Horenko; Martin Weiser. *Adaptive Integration of Multidimensional Molecular Dynamics with Quantum Initial Conditions.*

**Abstract:** The paper presents a particle method framework for resolving molecular dynamics. Error estimators for both the temporal and spatial discretization are advocated and facilitate a fully adaptive propagation.

For time integration, the implicit trapezoidal rule is employed, where an explicit predictor enables large time steps.

The framework is developed and exemplified in the context of the classical Liouville equation, where Gaussian phase-space packets are used as particles. Simplified variants are discussed shortly, which should prove to be easily implementable in common molecular dynamics codes. A concept is illustrated by numerical examples for one-dimensional dynamics in double well potential.

**ZIB-Report 02-30.** Monika Kuberek (Red.). *Spezifikation für eine Verbund-Fernleih-Software im KOBV.*

**Zusammenfassung:** Nachdem mit der KOBV-Suchmaschine die Online-Recherche in den wichtigsten Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken realisiert ist, gehört der Aufbau der Online-Fernleihe als einer neuen, nutzerfreundlichen Dienstleistung zu den drängendsten Desideraten des KOBV. Dem Nutzer soll ein komfortabler Service geboten werden, der ihm im Anschluss an eine erfolgreiche Recherche die nahtlose - per Knopfdruck ausgelöste - Fernleih-Bestellung auf das gewünschte Medium erlaubt. Gleichzeitig trägt die Ablösung des traditionellen, per Post und Bücherauto versandten Roten Fernleih-scheines durch eine sekundenschnelle Online-Kommunikation zu einer erheblichen Beschleunigung des Fernleih-Verfahrens bei.

Der KOBV beteiligt sich an der Initiative der deutschen Bibliotheksverbände zur Automatisierung und Beschleunigung der Fernleihe. Die Realisierung soll im KOBV in einem zweistufigen Verfahren erfolgen: (1) verbundinterne Fernleihe im KOBV und (2) verbundübergreifende Fernleihe in der Zusammenarbeit mit den anderen Verbänden.



Eine Verbund-Fernleih-Software für den KOBV muss insbesondere den KOBV-spezifischen Gegebenheiten genügen, die in dieser Form in den anderen deutschen Verbänden nicht anzutreffen sind. Im Jahre 2001 hat eine KOBV-Arbeitsgruppe Spezifikationen für eine Verbund-Fernleih-Software erarbeitet, in der die Besonderheiten des KOBV mit berücksichtigt sind. Beim Aufbau der automatisierten Fernleihe als einer regulären KOBV-Dienstleistung geht es nicht allein darum, einen schnellen, komfortablen Service für Nutzer einzurichten, sondern darüber hinaus um eine weitreichende Rationalisierung innerhalb der Bibliotheken. Das vorliegende Spezifikationspapier zielt auf beide Faktoren ab, indem es die Fernleihe als integrierten Dienst entwirft, der von der Bestellung bis zur Bereitstellung des Mediums in der gebenden Bibliothek automatisiert - ohne manuelles Eingreifen der Fernleihstelle - abläuft: die jetzige manuell durchgeführte Fernleihe wird durch die automatisierte Fernleihe abgelöst.

**ZIB-Report 02-31.** Peter Deuffhard; Reinhard Hochmuth. *Multiscale Analysis of Thermoregulation in the Human Microvascular System.*

**Abstract:** The bio-heat transfer equation is a macroscopic model for describing the heat transfer in microvascular tissue. So far the deduction of the Helmholtz term in the bio-heat transfer equation is not co role. In view of a future numerical application of this new mathematical model to treatment planning in hyperthermia we derive asymptotic estimates for first and second order correctors.

**ZIB-Report 02-32.** Tobias Achterberg; Thorsten Koch; Alexander Martin. *Branching on History Information.*

**Abstract:** Mixed integer programs (*MIPs*) are commonly solved with branch and bound algorithms based on linear programming. The success and the speed of the algorithm strongly depends on the strategy used to select the branching variables. Today's state-of-the-art strategy is called *pseudocost branching* and uses information of previous branchings to determine the current branching.

We propose a modification of *pseudocost branching* which we call *history branching*. This strategy has been implemented in *SIP*, a state-of-the-art *MIP* solver. We give computational results that show the superiority of the new strategy.

**ZIB-Report 02-33.** Peter Deuffhard; Ulrich Nowak; Martin Weiser. *Affine Invariant Adaptive Newton Codes for Discretized PDEs.*

**Abstract:** The paper deals with three different Newton algorithms that have recently been worked out in the general frame of affine invariance. Of particular interest is their performance in the numerical solution of discretized boundary value problems (BVPs) for nonlinear partial differential equations (PDEs). Exact Newton methods, where the arising linear systems are solved by direct elimination, and inexact Newton methods, where an inner iteration is used instead, are synoptically presented, both in affine invariant convergence theory and in numerical experiments. The three types of algorithms are: (a) affine covariant (formerly just called affine invariant) Newton algorithms, oriented toward the iterative errors, (b) affine contravariant Newton algorithms, based on iterative

residual norms, and (c) affine conjugate Newton algorithms for convex optimization problems and discrete nonlinear elliptic PDEs.

**ZIB–Report 02-34.** Adrian Zymolka; Arie M. C. A. Koster; Roland Wessälly. *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion.*

**Abstract:** We consider the design of transparent optical networks from a practical perspective. Network operators aim at satisfying the communication demands at minimum cost. Such an optimization involves three interdependent planning issues: the dimensioning of the physical topology, the routing of lightpaths, and the wavelength assignment. Further topics include the reliability of the configuration and sparse wavelength conversion for efficient use of the capacities. In this paper, we investigate this extensive optical network design task. Using a flexible device-based model, we present an integer programming formulation that supports greenfield planning as well as expansion planning on top of an existing network. As solution method, we propose a suitable decomposition approach that separates the wavelength assignment from the dimensioning and routing. Our method in particular provides a lower bound on the total cost which allows to rate the solution quality. Computational experiments on realistic networks approve the solution approach to be appropriate.

**ZIB–Report 02-35.** Ralf Hülsermann; Monika Jäger; Sven O. Krumke; Diana Poensgen; Jörg Rambau; Andreas Tuchscherer. *Dynamic Routing Algorithms in Transparent Optical Networks. An Experimental Study Based on Real Data.*

**Abstract:** Today's telecommunication networks are configured statically. Whenever a connection is established, the customer has permanent access to it. However, it is observed that usually the connection is not used continuously. At this point, dynamic provisioning could increase the utilization of network resources. WDM based Optical Transport Networks (OTNs) will shortly allow for fast dynamic network reconfiguration. This enables optical broadband leased line services on demand. Since service requests competing for network resources may lead to service blocking, it is vital to use appropriate strategies for routing and wavelength assignment in transparent optical networks. We simulate the service blocking probabilities of various dynamic algorithms for this problem using a well-founded traffic model for two realistic networks. One of the algorithms using shortest path routings performs best on all instances. Surprisingly, the tie-breaking rule between equally short paths in different wavelengths decides between success or failure.

**ZIB–Report 02-36.** Sven O. Krumke; Luigi Laura; Maarten Lipmann; Alberto Marchetti-Spaccamela; Willem E. de Paepe; Diana Poensgen; Leen Stougie. *Non-Abusiveness Helps: An  $O(1)$ -Competitive Algorithm for Minimizing the Maximum Flow Time in the Online Traveling Salesman Problem.*

**Abstract:** In the online traveling salesman problem *oltsp* requests for visits to cities arrive online while the salesman is traveling. We study the  $F_{max}$  –

*OLTSP* where the objective is to minimize the maximum flow time. This objective is particularly interesting for applications. Unfortunately, there can be no competitive algorithm, neither deterministic nor randomized. Hence, competitive analysis fails to distinguish online algorithms. Not even resource augmentation which is helpful in scheduling works as a remedy. This unsatisfactory situation motivates the search for alternative analysis methods.

We introduce a natural restriction on the adversary for the  $F_{max} - OLTSP$  on the real line. A *non-abusive adversary* may only move in a direction if there are yet unserved requests on this side. Our main result is an algorithm which achieves a constant competitive ratio against the non-abusive adversary.

**ZIB-Report 02-37.** Stefan Litsche; Dagmar Otto. *Dynamisches Verlinken mit SFX und MetaLib.*

**Zusammenfassung:** Zeitschriften und andere Medien werden in wachsendem Maße elektronisch publiziert. Hier entsteht für die Bibliotheken, welche diese Online-Publikationen ihren Lesern zur Verfügung stellen, ein neuer Bereich der Informationsvermittlung. Mit dem aufkommenden Standard der OpenURL ergeben sich neue Möglichkeiten, dem Benutzer weiterführende Links und Dienste anzubieten.

Das Document-Linking-System SFX der Firma Ex Libris ist die erste und bekannteste Anwendung, die ein Managementsystem für die Auswertung der OpenURL implementiert. Im Rahmen eines Projektes hat die Zentrale des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) eine Evaluation von SFX durchgeführt. Als Ergebnis der Evaluation sollten Einsatzmöglichkeiten von SFX für die KOBV-Suchmaschine und in den lokalen Bibliothekssystemen und Informationsportalen aufgezeigt werden. Im Verlauf des Projektes hat sich das Produkt SFX als eine stabile Anwendung erwiesen, die dem Benutzer interessante zusätzliche Dienste bieten kann.

**ZIB-Report 02-38.** Martin Schlegel; Wolfgang Marquardt; Rainald Ehrig; Ulrich Nowak. *Sensitivity analysis of linearly-implicit differential-algebraic systems by one-step extrapolation.*

**Abstract:** In this work we present an approach for the sensitivity analysis of linearly-implicit differential-algebraic equation systems. Solutions for both, states and sensitivities are obtained by applying an extrapolated linearly implicit Euler discretization scheme. This approach is compared to the widely used sensitivity extensions of multi-step BDF methods by means of case studies. Especially, we point out the benefit of this method in the context of dynamic optimization using the sequential approach.

**ZIB-Report 02-39.** Hans Falk Hoffmann; Alois Putzer; Alexander Reinefeld. *Vom World Wide Web zum World Wide Grid - Eine neue Informationsinfrastruktur für wissenschaftliche Anwendungen.*

**Abstract:** In Analogie zu den Elektrizitätsnetzen (electricity grid), von denen die technische Revolution ausging, wurde der Begriff Computational Grid (kurz

Grid) geprägt. Ein wichtiger Bestandteil des Systems liegt im benutzerfreundlichen Zugang und der koordinierten Nutzung der weltweit verteilten Speicherressourcen und Rechnerkapazitäten. Bei der Entwicklung dazu notwendiger Technologien und Software (Middleware) profitiert man von Kenntnissen und Erfahrungen bei der Entwicklung verteilter Algorithmen, dem Software-Engineering und dem Supercomputing.

**ZIB-Report 02-40.** Frank Cordes; Marcus Weber; Johannes Schmidt-Ehrenberg. *Metastable conformations via successive Perron cluster cluster-analysis of dihedrals.*

**Abstract:** Decomposition of the high dimensional conformational space of biomolecules into metastable subsets is used for data reduction of long molecular trajectories in order to facilitate chemical analysis and to improve convergence of simulations within these subsets.

The metastability is identified by the Perron-cluster cluster analysis of a Markov process that generates the thermodynamic distribution. A necessary prerequisite of this analysis is the discretization of the conformational space. A combinatorial approach via discretization of each degree of freedom will end in the so called "curse of dimension".

In the following paper we analyze Hybrid Monte Carlo simulations of small, drug-like biomolecules and focus on the dihedral degrees of freedom as indicators of conformational changes. To avoid the "curse of dimension", the projection of the underlying Markov operator on each dihedral is analyzed according to its metastability. In each decomposition step of a recursive procedure, those significant dihedrals, which indicate high metastability, are used for further decomposition. The procedure is introduced as part of a hierarchical protocol of simulations at different temperatures. The convergence of simulations within metastable subsets is used as an "a posteriori" criterion for a successful identification of metastability. All results are presented with the visualization program AmiraMol.

**ZIB-Report 02-41.** Andreas Bley; Thorsten Koch. *Integer programming approaches to access and backbone IP-network planning.*

**Abstract:** In this article we study the problem of designing a nation-wide communication network. Such networks usually consist of an access layer, a backbone layer, and maybe several intermediate layers. The nodes of each layer must be connected to those of the next layer in a tree-like fashion. The backbone layer has to satisfy certain survivability and routing constraints.

Given the node locations, the demands between them, the possible connections and hardware configurations, and various other technical and administrative constraints, the goal is to decide, which node is assigned to which network level, how the nodes are connected, what hardware must be installed, and how traffic is routed in the backbone.

Mixed integer linear programming models and solution methods are presented

for both the access and the backbone network design problem. The focus is on the design of IP-over-SDH networks, but the access network design model and large parts of the backbone network design models are general and also applicable for other types of communication networks. Results obtained with these methods in the planning of the German research network are presented.

**ZIB-Report 02-42.** Bodo Erdmann; Jens Lang; Rainer Roitzsch. *Kardos<sup>TM</sup> User's Guide*.

**Abstract:** The adaptive finite element code KARDOS solves nonlinear parabolic systems of partial differential equations. It is applied to a wide range of problems from physics, chemistry, and engineering in one, two, or three space dimensions. The implementation is based on the programming language C. Adaptive finite element techniques are employed to provide solvers of optimal complexity. This implies a posteriori error estimation, local mesh refinement, and preconditioning of linear systems. Linearly implicit time integrators of *Rosenbrock* type allow for controlling the time steps adaptively and for solving nonlinear problems without using *Newton's* iterations. The program has proved to be robust and reliable.

The user's guide explains all details a user of KARDOS has to consider: the description of the partial differential equations with their boundary and initial conditions, the triangulation of the domain, and the setting of parameters controlling the numerical algorithm. A couple of examples makes familiar to problems which were treated with KARDOS.

We are extending this guide continuously. The latest version is available by network: <http://www.zib.de/SciSoft/kardos/> (*Downloads*).

**ZIB-Report 02-43.** Sabine Hansmann; Sandra Loesch; Gabriele Morstein; Werner Müller; Kathrin Müntner; Ute Ristau; Beate Rusch; Günter Todt; Petra Wagenknecht. *Fremddatennutzung im KOBV: Eine Evaluation vom Mai / Juni 2002*.

**Zusammenfassung:** Eine fremddatengestützte Katalogisierung bedeutet für die einzelne Bibliothek unbestritten eine Zeit- und Kostenersparnis. Dieser Report beleuchtet die unterschiedlichen Faktoren technischer und organisatorischer Natur, die die Fremddatennutzung in der dezentralen Struktur des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) beeinflussen. Die Ausführungen stützen sich im Wesentlichen auf eine Umfrage, die die Autoren im Mai / Juni 2002 unter KOBV-Mitgliedsbibliotheken zum Thema Fremddatennutzung durchgeführt haben.

Dargelegt wird, wie komfortabel die in den KOBV-Bibliotheken eingesetzten Bibliotheksinformationssysteme eine fremddatengestützte Katalogisierung erlauben. Diskutiert wird zudem die Software ZACK, die sich als Alternative zu einem eigenen Z39.50-Client zur Datenübernahme anbietet. Erstmals seit Bestehen des Verbundes werden Zahlen veröffentlicht über den Anteil der Bibliotheken, die Fremddaten nutzen und denjenigen, die dieses Angebot nicht wahrnehmen. Dabei wird die Fremddatennutzung differenziert sowohl für den

Bereich der Neuaufnahmen als auch für die Retrokatalogisierung. In der weiteren Analyse werden zusätzliche Aspekte betrachtet wie z.B. die verfügbaren bzw. gewünschten Datenbanken im Verhältnis zum sprachlichen Spektrum des erworbenen Katalogisierungsgutes. Eingegangen wird auch auf die von den Bibliotheken genannten Hauptproblemen und die gewünschten zusätzlichen Serviceleistungen auf Seiten der KOBV-Verbundzentrale.

Als Ergebnis dieses Status-Quo-Berichts legt das Autorenteam eine Reihe von Empfehlungen vor, die darauf abzielen, auch für KOBV-Bibliotheken in Zukunft eine Fremddatennutzungsquote von 70 - 75 % zu erreichen.

**ZIB-Report 02-44.** Sven O. Krumke; Jörg Rambau; Luis M. Torres. *Online-Dispatching of Automobile Service Units.*

Appeared in: Operations Research Proceedings 2002. Selected Papers of the International Conference on Operations Research (SOR 2002), Klagenfurt, September 2-5, 2002. U. Leopold-Wildburger et al. (eds.) Berlin: Springer 2003. Pp. 150-155

**Abstract:** We present an online algorithm for a real-world vehicle dispatching problem at ADAC, the German Automobile Association.

**ZIB-Report 02-45.** Frank Schmidt. *A New Approach to Coupled Interior-Exterior Helmholtz-Type Problems: Theory and Algorithms.*

**Abstract:** The work presents a new approach to the numerical solution of time-harmonic and time-dependent scattering problems. We replace Sommerfeld's radiation condition valid for the Helmholtz equation by a more general concept called pole condition. The pole condition is based on the Laplace transform of the exterior solution and allows a characterization of outgoing waves. Both new insight into the analysis of scattering problems as well as new numerical algorithms are obtained.

**ZIB-Report 02-46.** Peter Deuffhard. *A Comparison of Related Concepts in Computational Chemistry and Mathematics.*

**Abstract:** This article studies the relation of the two scientific languages Chemistry and Mathematics via three selected comparisons: (a) QSSA versus dynamic ILDM in reaction kinetics, (b) lumping versus discrete Galerkin methods in polymer chemistry, and (c) geometrical conformations versus metastable conformations in drug design. The common clear message from these comparisons is that chemical intuition may pave the way for mathematical concepts just as chemical concepts may gain from mathematical precision. Along this line, significant improvements in chemical research and engineering have already been possible – and can be further expected in the future from the dialogue between the two scientific languages.

**ZIB-Report 02-47.** Christiane Helling. *Circuit of Dust in Substellar Atmospheres.*

**Abstract:** Substellar atmospheres are cool and dense enough that dust forms very efficiently. As soon as these particles are formed, they sizedependently preci-

pitae due to the large gravity of the objects. Arriving in hot atmospheric layers, the dust evaporates and enriches the gas by those elements from which it has formed. The upper atmospheric layers are depleted by the same elements. Non-continuous and spatially inhomogeneous convective element replenishment, generating a turbulent fluid field, completes the circuit of dust.

The formation of dust in substellar atmosphere is described by extending the classical theory of Gail& Sedlmayr for the case of different gas and dust velocities. Turbulence is modeled in different scale regimes which reveals turbulence as trigger for dust formation in hot environments. Both mechanisms cause the dust to be present in else wise dust-hostile region: precipitation transports the dust into hot regions, and turbulence allows the formation of dust in there.

**ZIB-Report 02-48.** Thomas Wolf. *Applications of CRACK in the Classification of Integrable Systems.*

**Abstract:** The talk given by the author at the CRM workshop on Superintegrability in Sep. 2002 and this related paper report on work in two subjects. One is the collaboration with Vladimir Sokolov and Takayuki Tsuchida in an effort to classify polynomial integrable vector evolution equations. The other is the computer algebra package CRACK which did the main computations in solving large bi-linear algebraic systems. Although originally designed to solve over-determined systems of partial differential equations a number of extensions made CRACK a powerful tool for solving systems of bi-linear algebraic equations. Such systems turn up in many different classification problems some of which were investigated by other participants of this workshop. Two additional applications are outlined.

In the talk on which this article is based a method to reduce the length of equations was presented which proved to be useful in solving the bi-linear algebraic systems. Due to numerous asked questions about the computer program, a more complete overview is given in the appendix.

**ZIB-Report 02-49.** Frank van den Eijkhof; Hans L. Bodlaender; Arie M.C.A. Koster. *Safe reduction rules for weighted treewidth.*

**Abstract:** Several sets of reductions rules are known for preprocessing a graph when computing its treewidth. In this paper, we give reduction rules for a weighted variant of treewidth, motivated by the analysis of algorithms for probabilistic networks. We present two general reduction rules that are safe for weighted treewidth. They generalise many of the existing reduction rules for treewidth. Experimental results show that these reduction rules can significantly reduce the problem size for several instances of real-life probabilistic networks.

**ZIB-Report 02-50.** Andreas Eisenblätter; Arie M.C.A. Koster; Randolf Wallbaum; Roland Wessály. *Load Balancing in Signaling Transfer Points.*

**Abstract:** Signaling is crucial to the operation of modern telecommunication networks. A breakdown in the signaling infrastructure typically causes customer service failures, incurs revenue losses, and hampers the company image. There-

fore, the signaling network has to be highest reliability and survivability. This in particular holds for the routers in such a network, called *signaling transfer points* (STPs).

The robustness of an STP can be improved by equally distributing the load over the internal processing units. Several constraints have to be taken into account. The load of the links connected to a processing unit changes over time introducing an imbalance of the load.

In this paper, we show how integer linear programming can be applied to reduce the imbalance within an STP, while keeping the number of changes small. Two alternative models are presented. Computational experiments validate the integer programming approach in practice. The GSM network operator E-Plus saves substantial amounts of time and money by employing the proposed approach.

**ZIB-Report 02-51.** Peter Woitke; Christiane Helling. *Dust in brown dwarfs II. The coupled problem of dust formation and sedimentation.*

**Abstract:** In this paper, we quantify and discuss the physical and surface chemical processes leading to the formation, temporal evolution and sedimentation of dust grains in brown dwarf and giant gas planet atmospheres: nucleation, growth, evaporation and gravitational settling. Considering dust particles of arbitrary sizes in the different hydrodynamical regimes (free molecular flow, laminar flow, turbulent flow), we evaluate the equilibrium drift velocities (final fall speeds) and the growth rates of the particles due to accretion of molecules. We show that a depth-dependent maximum size of the order of  $a_{\max} \approx 1 \mu\text{m}$  (upper regions) . . .  $100 \mu\text{m}$  (lower regions) exists, which depends on the condensate and the stellar parameters, beyond which gravitational settling is faster than growth. Larger particles can probably not be formed and sustained in brown dwarf atmospheres. We furthermore argue that the acceleration towards equilibrium drift is always very fast and that the temperature increase of the grains due to the release of latent heat during the growth process is negligible. Based on these findings, we formulate the problem of dust formation coupled to the local element depletion/enrichment of the gas in brown dwarf atmospheres by means of a system of partial differential equations. These equations state an extension of the moment method developed by Gail & Sedlmayr,(1988) with an additional advective term to account for the effect of size-dependent drift velocities of the grains. A dimensionless analysis of the new equations reveals a hierarchy of nucleation  $\rightarrow$  growth  $\rightarrow$  drift  $\rightarrow$  evaporation, which characterises the life cycle of dust grains in brown dwarf atmospheres. The developed moment equations can be included into hydrodynamics or classical stellar atmosphere models. Applications of this description will be presented in a forthcoming paper of this series.

**ZIB-Report 02-52.** Florian Schintke; Alexander Reinefeld. *On the Cost of Reliability in Large Data Grids.*

**Abstract:** Global grid environments do not only provide massive aggregated



computing power but also an unprecedented amount of distributed storage space. Unfortunately, dynamic changes caused by component failures, local decisions, and irregular data updates make it difficult to efficiently use this capacity.

In this paper, we address the problem of improving data availability in the presence of unreliable components. We present an analytical model for determining an optimal combination of distributed replica catalogs, catalog sizes, and replica servers. Empirical simulation results confirm the accuracy of our theoretical analysis.

Our model captures the characteristics of highly dynamic environments like peer-to-peer networks, but it can also be applied to more centralized, less dynamic grid environments like the European *DataGrid*.

**ZIB-Report 02-53.** Stefan Litsche. *Zur Zugriffskontrolle im KOBV*.

**Zusammenfassung:** Mit der Entwicklung des KOBV-Informationportals soll den Benutzern in der Region Berlin-Brandenburg ein verbesserter Zugang zu Informationsressourcen geboten werden. Einen wesentlichen Anteil dieser Aufgabe bilden die Anforderungen an die Zugriffskontrolle im KOBV definiert und Lösungsmöglichkeiten auf der Ebene allgemeiner Modelle diskutiert.

**ZIB-Report 02-54.** Maren Brodersen; Lavinia Hodoroaba. *Navigation in the KOBV-Informationportal Conceptual View*.

**Abstract:** The KOBV Informationportal aims to be a universal gateway to the sources of information hosted by the partner libraries from the Berlin-Brandenburg area. Due to the large number of these sources, an intuitive navigation is an essential component of the portal. The navigation-component should preserve the partner libraries' independence and overcome their administrative and technical differences.

This paper proposes a collection-level navigation with four dimensions: the sources' subject areas (e.g. the first two levels of DDC), the sources' type (e.g. e-journals, databases, OPACs, etc.), the sources' location (e.g. Berlin, Brandenburg) / the library that hosts that source and the sources' accessing state (e.g. free, restricted, etc.).

**ZIB-Report 02-55.** Monika Kuberek; Stefan Lohrum; Raluca Rascanu. *Endnutzerbasierte Online-Fernleihe im KOBV - Kurzbeschreibung*.

**Zusammenfassung:** Der KOBV setzt für die endnutzerbasierte Online-Fernleihe den Sisis ZFL-Server (Zentraler Fernleih-Server) ein. Mit dem Einsatz des ZFL-Servers können in den Bibliotheken echte Rationalisierungseffekte erzielt werden: Der Server ist in der Lage, Fernleih-Bestellungen an lokale Systeme zu übergeben, so dass sie im lokalen System automatisch - ohne Eingreifen von Bibliotheksmitarbeitern - weiterverarbeitet werden können. Im KOBV können derzeit Sisis- und Aleph-Lokalsysteme diese Schnittstelle voll bedienen. Andere Bibliothekssysteme im KOBV, die diese Schnittstelle nicht bedienen können, werden mittels eines E-Mail-Verfahrens in die Online-Fernleihe inte-

griert.

Die vorliegende Kurzbeschreibung der Online-Fernleihe im KOBV soll - im Gegensatz zur Spezifikation, die möglichst vollständig sein sollte - einen leicht verständlichen Einblick in die Abläufe der Online-Fernleihe vermitteln. Nach einem Überblick über zu erwartende Rationalisierungseffekte ist der Ablauf einer Online-Fernleih-Bestellung - veranschaulicht durch eine Graphik mit dem technischen Aufbau im KOBV - kurz dargestellt.

## 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, Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, Production: SOLGRAF Publicações, Rio de Janeiro, Brasilien
- Computing. Archives for Scientific Computing, Springer-Verlag, Wien, Österreich
- Mathematical Methods of Operations Research, Physica-Verlag (Springer-Verlag), Heidelberg
- Mathematical Programming A, Springer-Verlag, Berlin
- Mathematics of Operations Research, INFORMS, Linthicum, MD, USA
- Networks, John Wiley & Sons, New York, NY, USA
- Operations Research Letters, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, Niederlande
- OR Transactions, Shanghai Scientific & Technological Publishing House, Shanghai, VR China
- SIAM Journal on Discrete Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, USA
- Surveys on Mathematics for Industry, Springer-Verlag, Wien, Österreich

**Alexander Reinefeld**

- Journal of Grid Computing, Kluwer Academic Publishers

**5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden**

1. G. Allen, D. Angulo, T. Goodale, T. Kielmann, A. Merzky, J. Nabrzyski, J. Pukacki, M. Russell, T. Radke, E. Seidel, J. Shalf, I. Taylor. *GridLab: Enabling Applications on the Grid: A Progress Report*, 3rd Int. Workshop on Grid Computing, Supercomputing 2002, Lecture Notes in Computer Science (LNCS), vol. 2536, pp. 39–45, 2002.
2. C. Best, H.-C. Hege, *Visualizing and Identifying Conformational Ensembles in Molecular Dynamics Trajectories*, IEEE Computing in Science & Engineering, May/June 2002, pp. 68–75.
3. T. Böhm: *Web Service Based Data Management for Grid Applications*. In: Matthews, B. et al. (eds.) *Euroweb 2002 - The Web and the GRID: from e-science to e-business*, Oxford, UK, pp. 126–135, 2002.
4. R. Borndörfer, A. Löbel und S. Weider, *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Verkehr*, in Heureka '02: Optimierung in Verkehr und Transport, Forschungsgesellschaft für Straßen- und Verkehrswesen, Köln (2002), 77–98.
5. D. Braess, P. Deuffhard, K. Lipnikov: *A Subspace Cascadic Multigrid Method for Mortar Elements*. Springer-Verlag Computing 69, pp. 205–225 (2002).
6. A. Brandt und M. Brandt, *Asymptotic results and a Markovian approximation for the  $M(n)/M(n)/s+GI$  system*, Queueing Syst. **41** (2002), 73–94.
7. A. Brandt und M. Brandt, *On the moments of overflow and freed carried traffic for the  $GI/M/C/0$  system*, Methodol. Comput. Appl. Probab. **4** (2002), 69–82.
8. H. Busch, *Ein neuer Supercomputer für die norddeutsche Wissenschaft*, Zedat Mitteilungsblatt des Hochschulrechenzentrums der FU Berlin, Herbst 2002.
9. H. Busch, S. Heidl, R. Staudemeyer, M. Stolle, *Teleimmersion – Erfahrungen mit der Gigabit-Ethernet-Strecke zwischen Berlin und Hannover*, DFN Mitteilungen, Heft 58, März 2002.
10. H. Busch, A. Merzky, *Supercomputer - Auf zwei Standorte verteiltes Rechnersystem wird im Wissenschaftsnetz zum virtuellen Supercomputer*, DFN Mitteilungen, Heft 59, Juni 2002.
11. P. Čapek, K. Ehrhardt, *Dynamics of multicomponent mass transport with complex reaction in a porous catalyst*, Applied Catalysis A: General **224** (2002), 255–269.

12. L. Coconu, H.-C. Hege: *Hardware-Accelerated Point-Based Rendering of Complex Scenes*. Proc. 13th Eurographics Workshop on Rendering Techniques 2002, pp. 43–52, 2002.
13. W. Dalitz, W. Neun, W. Sperber *Semantic Annotation in Mathematics and Math-Net*, in: Annotation for the Semantic Web, IOS Press, to appear
14. P. Deuffhard, V. Mehrmann: *Numerical Analysis and Scientific Computing in Key Technologies*. Festschrift “DFG Research Center Mathematics for Key Technologies”, Berlin. Berl. Math. Gesellschaft, pp. 9–19 (November 2002).
15. 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), pp. 1151–1163 (2002).
16. A. Eisenblätter, *The semidefinite relaxation of the k-partition polytope is strong*, Proceedings of the 9th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO’02) (Berlin Heidelberg) (W. J. Cook und A. S. Schulz, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 2337, Springer, 2002, 273–290.
17. A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequency planning and ramifications of coloring*, Discussiones Mathematicae Graph Theory **22** (2002), Nr. 1, 51–88.
18. A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequenzplanung im Mobilfunk*, DMV-Mitteilungen (2002), Nr. 1, 18–25.
19. A. Eisenblätter, T. Koch, A. Martin, T. Achterberg, A. Fügenschuh, A. M. C. A. Koster, O. Wegel und R. Wessälly, *Modelling Feasible Network Configurations for UMTS*, Telecommunications Network Design and Management (G. Anandalingham und S. Raghavan, Hrsg.), Kluwer Academic Publishers, 2002, 1–24.
20. 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*, Proceedings of 9th Workshop on The Finite Element Method in Niomedical Engineering, Biomechanics and related Fields, Ulm, Germany, 2002
21. A. Fischer, Ch. Schütte, P. Deuffhard, F. Cordes: *Hierarchical Uncoupling–Coupling of Metastable Conformations*. In: T. Schlick and H.H. Gan (eds.), Computational Methods for Macromolecules: Challenges and Applications. Proceedings of the 3rd International Workshop on Methods for Macromolecular Modeling, New York, 2000, Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE), Springer Verlag Vol. 24, pp. 235–259, (2002).
22. T. Galliat, P. Deuffhard, R. Roitzsch, F. Cordes: *Automatic Identification of Metastable Conformations via Self–Organized Neural Networks*. In: T. Schlick and H.H. Gan (eds.), Computational Methods for Macromolecules: Challenges and Applications. Proceedings of the 3rd International Workshop on Methods

- for Macromolecular Modeling, New York, 2000, Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE), Springer Verlag Vol. 24, pp. 260–284, (2002).
23. K. Gatermann, B. Huber. *A family of sparse polynomial systems arising in chemical reaction systems* Journal of Symbolic Computation 33(3), 275–305 (2002).
  24. K. Gatermann, *Graph Theory Applications in Chemistry*, Proceedings of EWM-workshop Groups and Graphs (2002).
  25. K. Gatermann, *Applications of SAGBI bases in dynamics*, Accepted by Journal of Symbolic Computation (2002).
  26. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Biomechanisches Modell zur Abschätzung der individuellen Gesichtsmimik*. In: M. Meiler, D. Saupe, F. Krugel, H. Handels, T. Lehmann (eds.), Proc. Workshop “Bildverarbeitung für die Medizin” (BVM), Dresden, Germany, Springer-Verlag, pp. 25–28, 2002.
  27. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Shape-based modeling approach for the estimation of individual facial mimics in craniofacial surgery planning*. SPIE Medical Imaging, San Diego, USA, 2002.
  28. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Adaptive nonlinear elastic FEM for realistic soft tissue prediction in craniofacial surgery simulations*. SPIE Medical Imaging, San Diego, USA, 2002.
  29. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *A nonlinear soft tissue model for craniofacial surgery simulations*. In: Modelling and Simulation for Computer-Aided Medicine and Surgery, INRIA Rocquencourt, November 12–15th, 2002.
  30. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege: *Biomechanical modeling of individual facial emotion expressions*. In: Proc. of Visualization, Imaging, and Image Processing (VIIP), Malaga, Spain, pp. 7–11, 2002.
  31. W. Gowin, P. Saporin, S. Prohaska, H.-C. Hege, D. Felsenberg: *Femoral Neck Fractures: Reasons for the Most Common Location of Fractures*. Acta Orthop Scand (Suppl 304), p. 73, 2002
  32. M. Grötschel, *P=NP?*, Elemente der Mathematik, Eine Zeitschrift der Schweizerischen Mathematischen Gesellschaft, **57** (2002), Nr. 3, 96–102.
  33. M. Grötschel, *Telota*, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften: Jahrbuch 2001 (Sonja Ginnow unter Mitwirkung von Kathrin Künzel, Hrsg.), Akademie-Verlag, Berlin, 439–445, 2002.
  34. M. Grötschel, *The DFG research center “Mathematics for key technologies”*: *How it began and where it is heading*, BMG 2002, Herausgegeben vom Vorstand der Berliner Mathematischen Gesellschaft, 3–8, November 2002.

35. M. Grötschel, S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Making the Yellow Angels Fly: Online Dispatching Of Service Vehicles in Real Time*, SIAM News, **35** (2002), Nr. 4, 10–11.
36. C. Gutwenger, M. Jünger, G. W. Klau, S. Leipert, P. Mutzel und R. Weiskircher, *AGD: A Library of Algorithms for Graph Drawing*, Proc. GD 2001 (Int. Symp. on Graph Drawing, Wien, Österreich, September 2001), LNCS 2265, Springer, Berlin, 2002, 473–474.
37. C. Gutwenger, M. Jünger, G. W. Klau, S. Leipert und P. Mutzel, *Graph Drawing Algorithm Engineering with AGD*, Software Visualization: State of the Art Survey. (Proc. Int. Dagstuhl Seminar on Software Visualization, Schloss Dagstuhl, Mai 2001), Stephan Diehl (Hrsg.), LNCS 2269, Springer, Berlin, 2002, 307–333.
38. H.-C. Hege, H. Schirmacher, M. Westerhoff, H. Lamecker, S. Prohaska, S. Zachow: *From Image Data to Three- Dimensional Models – Case Studies on the Impact of 3D Patient Models*, In: Proc. of Japan Korea Computer Graphics Conference (JKCGC) 2002, Kanazawa University, Ishikawa, Japan, 2002
39. H.-C. Hege, A. Merzky: *GriKSL – Immersive Überwachung und Steuerung von Simulationen auf entfernten Supercomputern*. DFN-Mitteilungen, Heft 59, Sept. 2002, pp. 5–7.
40. H.-C. Hege, R. Kähler, E. Seidel, T. Radke: *GriKSL zeigt Live-Demos auf der iGrid2002*. DFN-Mitteilungen, Heft 60, Nov. 2002, pp. 21–22.
41. M. Henk und A. Wagler, *Auf dem Weg von der Vermutung zum Theorem: Die Starke-Perfekte-Graphen-Vermutung*, DMV-Mitteilungen 3/2002.
42. T. Hierl, G. Wollny, S. Zachow, R. Klöppel: *Visualisierung von Knochen und Weichteilveränderungen in der Distractionsosteogenese des Mittelgesichtes*. 10. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Schädelbasischirurgie, Heidelberg, November 8–9th, 2002.
43. C. P. M. van Hoesel, A. M. C. A. Koster, R. L. M. J. van de Leensel und M. W. P. Savelsbergh, *Polyhedral results for the edge capacity polytope*, Mathematical Programming, series A **92** (2002), Nr. 2, 335–358.
44. I. Horenko, M. Weiser: *Adaptive Integration of Multidimensional Molecular Dynamics with Quantum Initial Conditions*. Report 02-29, ZIB, 2002
45. R. Kähler, H.-C. Hege: *Texture-based Volume Rendering of Adaptive Mesh Refinement Data*. The Visual Computer, 18:481–492, Springer-Verlag 2002.
46. R. Kähler, D. Cox, R. Patterson, S. Levy, H.-C. Hege, T. Abel: *Rendering the First Star in the Universe - A Case Study*. Proceedings of IEEE Visualization 2002, pp. 537–540.
47. V. Kaibel und M. E. Pfetsch, *Computing the face lattice of a polytope from its vertex-facet incidences*, Comput. Geom. **23** (2002), Nr. 3, 281–290.

48. G. W. Klau und P. Mutzel, *Automatic Layout and Labelling of State Diagrams*, in *Mathematics – Key Technology for the Future. Joint Projects Between Universities and Industry*, W. Jäger und H.–J. Krebs (Hrsg.), Springer, Berlin, 2002, 584–608.
49. G. W. Klau und P. Mutzel, *Optimal Labeling of Point Features in Rectangular Labeling Models*, *Mathematical Programming, Series B, Special Issue on the 4th Aussois Meeting on Combinatorial Optimization (2000)*, T. Liebling und L. Wolsey (Hrsg.), DOI 10.1007/s10107-002-0327-9, 2002.
50. G. W. Klau, *A Combinatorial Approach to Orthogonal Placement Problems*, Proc. OR 2002 (Int. Conf. on Operations Research, Klagenfurt, Österreich, September 2002).
51. G. W. Klau, N. Lesh, J. Marks und M. Mitzenmacher, *Human-Guided Tabu Search*, Proc. AAAI 2002 (National Conf. on Artificial Intelligence, Edmonton, Alberta, Kanada, Juli/August 2002).
52. G. W. Klau, N. Lesh, J. Marks, M. Mitzenmacher und G. T. Schafer, *The HuGS Platform: A Toolkit for Interactive Optimization*, Proc. AVI 2002 (Int. Working Conf. on Advanced Visual Interfaces, Trento, Italien, Mai 2002).
53. A. M. C. A. Koster, C. P. M. van Hoesel und A. W. J. Kolen, *Solving partial constraint satisfaction problems with tree decomposition*, *Networks* **40** (2002), Nr. 3, 170–180.
54. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Stable Multi-Sets*, *Mathematical Methods of Operations Research* **56** (2002), Nr. 1, 45–65.
55. S. O. Krumke, L. Laura, M. Lipmann, A. Marchetti-Spaccamela, W. E. de Paepe, D. Poensgen und L. Stougie, *Non-abusiveness helps: An  $O(1)$ -competitive algorithm for minimizing the maximum flow time in the online traveling salesman problem*, *Proceedings of the 5th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science*, Bd. 2462, Springer, 2002, 200–214.
56. S. O. Krumke, M. Lipmann, W. de Paepe, D. Poensgen, J. Rambau, L. Stougie und G. J. Woeginger, *How to cut a cake almost fairly*, *Proceedings of the 13th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, 2002, 263–264.
57. S. O. Krumke, M. V. Marathe, D. Poensgen, S. S. Ravi und H.-C. Wirth, *Budgeted maximum graph coverage*, *Proceedings of the 28th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Lecture Notes in Computer Science*, Bd. 2573, Springer, 2002.
58. S. O. Krumke und D. Poensgen, *Online call admission in optical networks with larger wavelength demands*, *Proceedings of the 28th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Lecture Notes in Computer Science*, Bd. 2573, Springer, 2002.

59. S. O. Krumke und J. Rambau, *Probieren geht über Studieren? Entscheidungshilfen für kombinatorische Online-Optimierungsprobleme in der innerbetrieblichen Logistik*, at - Automatisierungstechnik **12** (2002).
60. S. O. Krumke, J. Rambau und L. M. Torres, *Real-time dispatching of guided and unguided automobile service units with soft time windows*, Proceedings of the 10th Annual European Symposium on Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2461, Springer, 2002, 637–648.
61. M. Kuberek *Der KOBV – eine regionale Service-Einrichtung für Nutzer und Bibliothekare*, Bibliotheksdienst (2002), Heft 4, 453–463.
62. H. Lamecker, T. Lange, M. Seebaß, *A Statistical Shape Model for the Liver*, Proceedings of MICCAI 2002, pp. 422–427, 2002.
63. J. Lang, B. Erdmann: *Three-Dimensional Adaptive Computation of Brine Transport in Porous Media*, Numerical Heat Transfer: Applications, Vol. 42, No. 1, 107–119 (2002)
64. F. H. Lutz, *Examples of  $\mathbb{Z}$ -acyclic and contractible vertex-homogeneous simplicial complexes*, Discrete Comput. Geom. **27** (2002), 137–154.
65. F. H. Lutz, *Császár's torus*, Electronic Geometry Model No. 2001.02.069 (2002), <http://www.eg-models.de/2001.02.069>.
66. J. Nadobny, H. Fähling, M.J. Hagmann, P.F. Turner, W. Wlodarczyk, J.M. Gellermann, P. Deuflhard, P. Wust: *Experimental and Numerical Investigation of Feed-Point 3-D Hyperthermia Applicator Using Different FDTD Models of Feed Networks*. IEEE Transactions on Biomedical Engineering, Vol. 49, No. 11, pp.1348–1359 (2002).
67. U. Nowak, A. Grah, M. Schreier: *Numerical Software for Simulation, Sensitivity Analysis and Parameter Estimation in Catalytic Gas Reactors*. Proceedings ACOMEN 2002
68. S. Olbrich, T. Weinkauff, A. Merzky, H. Knipp, H.-C. Hege, H. Pralle: *Lösungsansätze zur Visualisierung im High Performance Computing und Networking Kontext*. In: J. v. Knop, W. Haverkamp Hrsg.), Zukunft der Netze – Die Verletzbarkeit meistern, GI-Edition, Lecture Notes in Informatics, Volume P-17, pp. 269–279, 2002.
69. S. Prohaska, H.-C. Hege: *Fast Visualization of Plane-Like Structures in Voxel Data*, Proceedings of IEEE Visualization 2002, p. 29–36, 2002.
70. S. Prohaska, H.-C. Hege, M. Giehl, W. Gowin: *Visual Analysis of Trabecular Bone Structure*, Journal of Gravitational Physiology, 9(1), pp. 171–172, 2002.
71. J. Rambau, *TOPCOM: Triangulations of point configurations and oriented matroids*, Mathematical Software—ICMS 2002 (Arjeh M. Cohen, Xiao-Shan Gao und Nobuki Takayama, Hrsg.), World Scientific, 2002, 330–340.



72. A. Reinefeld, F. Schintke, *Concepts and Technologies for a Worldwide Grid Infrastructure*, Euro-Par 2002, Paderborn, Parallel Processing, Springer LNCS 2400, pp 62-71.
73. A. Reinefeld, H. Stüben, F. Schintke, G. Din, *GuiGen: A Toolset for Creating Customized Interfaces for Grid User Communities*, Future Generation Computing Systems (FGCS), vol. 18, no. 8, Oct. 2002, pp. 1075-1084.
74. M. J. Rosenberg, R. Agarwala, G. Bouffard, J. Davis, G. Fiermonte, M. S. Hilliard, T. Koch, L. M. Kalikin, I. Makalowska, D. H. Morton, E. M. Petty, J. L. Weber, F. Palmieri, R. I. Kelley, A. A. Schäffer und L. G. Biesecker, *Mutant deoxy-nucleotide carrier DNC is associated with congenital microcephaly*, Nature Genetics, **32** (2002), Nr. 1, 175–179.
75. B. Rusch *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg*, The Proceedings of Digital Library – IT Opportunities and Challenges in the New Millenium. Sun Jiazheng (ed.) Beijing, 2002, pp. 702–709.
76. K. Schaber, J. Körber, O. Ofenloch, R. Ehrig, P. Deuflhard: *Aerosol Formation in Gas–Liquid Contact Devices – Nucleation, Growth and Particle Dynamics*. Chem. Eng. Sci. 57, 4345-4356 (2002)
77. M. Schlegel, W. Marquardt, R. Ehrig, U. Nowak: *Sensitivity analysis of linearly-implicit differential-algebraic systems by one-step extrapolation*. Report 02-38, ZIB, 2002 submitted for publication in Appl. Num. Math.
78. J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum, H.-C. Hege: *Visualizing Dynamic Molecular Conformations* Proceedings of IEEE Visualization 2002, pp. 235–242, 2002.
79. S. D. Scott, N. Lesh und G. W. Klau, *Investigating Human-Computer Optimization*, Proc. CHI 2002 (Conf. on Human Factors in Computing Systems, Minneapolis, MS, USA, April 2002).
80. W. Sperber, *Math-Net and International and the Math-Net Page*, in: EIC conference, Beijing 2002, in Lecture Notes in Computer Science, to appear
81. M. C. Steinbach, *Tree-Sparse Convex Programs*, Mathematical Methods of Operations Research **56** (2002), Nr. 3, 347–376.
82. S. Volkwein und M. Weiser, *Affine invariant convergence analysis for inexact augmented Lagrangian-SQP methods*, SIAM J. Control Optim **41** (2002), 875–899.
83. T. Vredeveld and C. A. J. Hurkens, *Experimental comparison of approximation algorithms for scheduling unrelated parallel machines*, Inform's Journal on Computing **14** (2002), 175–189.
84. A. Wagler, *Rank-perfect and weakly rank-perfect graphs*, Mathematical Methods of Operations Research **95** (2002), 127–149.

85. T. Weinkauff, H. Theisel: *Vector Field Metrics Based on Distance Measures of First Order Critical Points*. Proc. of 10-th Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2002 (WSCG), Short Communication Papers, pp. 121–128, 2002.
86. T. Weinkauff, H. Theisel: *Curvature Measures of 3D Vector Fields and their Applications*. Proc. of 10-th Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2002 (WSCG), pp. 507–514, 2002.
87. M. Westerhoff, A. Maye, R. Brandt and R. Menzel, *3D Geometry Reconstruction in Neuroanatomy* Int. Neuroscience Summit, Berlin, 28. Nov.-1. Dez., Abstract Book, p. 49, 2002 ([www.ins2002.org](http://www.ins2002.org)).
88. S. Zachow, E. Gladilin, H.-C. Hege, P. Deuffhard: *Towards Patient Specific, Anatomy Based Simulation of Facial Mimics for Surgical Nerve Rehabilitation*. In: Lemke, H.U. et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Springer-Verlag, pp. 3–6, 2002.
89. S. Zachow, E. Gladilin, A. Trepczynski, R. Sader, H.-F. Zeilhofer: *3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery: Experiences and Results of Surgery Planning and Volumetric Finite-Element Soft Tissue Prediction in Three Clinical Cases*. In: Lemke, H.U. et al. (eds.): *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Springer-Verlag, pp. 983–987, 2002.
90. A. Zaikin, P. Saporin, S. Prohaska, J. Kurths, W. Gowin: *Bone Modeling and Structural Measures of Complexity*. *Journal of Gravitational Physiology*, Vol. 9, pp. 175–176, 2002.
91. H.-F. Zeilhofer, H.-C. Hege: *Operieren im Medizin-Grid*. DFN-Mitteilungen, Heft 60, Nov. 2002, pp. 19–20.

## 5.4 Monographien

1. P. Deuffhard, A. Hohmann: *Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung*. 3. überarbeitete und erweiterte Auflage. De Gruyter: Berlin, New York (2002).
2. P. Deuffhard, F. Bornemann: *Numerische Mathematik II. Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 2. vollständig überarbeitete und erweiterte Auflage. De Gruyter: Berlin, New York (2002).
3. P. Deuffhard, A. Hohmann: *Numerical Analysis in Modern Scientific Computing: An Introduction*. Second revised and extended edition. *Texts in Applied Mathematics (TAM)* **43**, Springer (2003).
4. P. Deuffhard, F. Bornemann: *Scientific Computing with Ordinary Differential Equations*. *Texts in Applied Mathematics (TAM)* **42**, Springer (2002).

5. G. W. Klau, *A Combinatorial Approach to Orthogonal Placement Problems*, Dissertation, Shaker, Aachen, April 2002.
6. M. E. Pfetsch, *The maximum feasible subsystem problem and vertex-facet incidences of polyhedra*, Dissertation, TU Berlin, Oktober 2002.
7. T. Vredeveld, *Combinatorial Approximation Algorithms: Guaranteed Versus Experimental Performance*, Eindhoven, Die Niederlande, 2002, Dissertation, TU Eindhoven.

## 5.5 Habilitationen

### Freie Universität Berlin

**Frank Schmidt** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Solution of Interior–Exterior Helmholtz–Type Problems Based on the Pole Condition Concept: Theory and Algorithms*

### Technische Universität Berlin

**Sven O. Krumke** (Abt. Optimierung)

*Online Optimization Competitive Analysis and Beyond*

**Jörg Rambau** (Abt. Optimierung)

*Kombinatorische Methoden in Geometrie, Topologie und Optimierung*

**Marc Steinbach** (Abt. Optimierung)

*Efficient Algorithms for Deterministic and Stochastic Dynamic Optimization*

## 5.6 Dissertationen

### Freie Universität Berlin

**Tobias Galliat** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Adaptive Multilevel Cluster Analysis by Self-Organizing Box Maps*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

## 5.7 Diplomarbeiten

### Freie Universität Berlin

**Roland Geng** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Berechnung der Eigenlösungen des Schrödinger–Operators auf unbeschränkten Gebieten in 1D*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

**Humboldt-Universität zu Berlin****Marlies Gollnick** (Abt. Computer Science Research)*Paralleles multiples Alignment mit Hidden Markov Modellen*

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB) und Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

**Sebastian Heidl** (Abt. Computer Science Research)*Implementation des Scheduled Transfer Protokolls für effektive Kommunikation in Linux-Clustern*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

**Thorsten Schütt** (Abt. Computer Science Research)*Synchronisation von verteilten Verzeichnisstrukturen*

Betreuer: Alexander Reinefeld (TU Berlin und ZIB)

**Anke Sensse** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Algebraic methods for the analysis of Hopf bifurcations in biochemical network*

Betreuer: Karin Gatermann (FU Berlin und ZIB)

**Ralf Staudemeyer** (Abt. Computer Science Research)*Technische Grundlagen des Nomadic Computing*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

**André Sternbeck** (Abt. Physik der HUB)*Spontaneous breaking of parity-flavour symmetry in two-flavour lattice QCD with dynamical Wilson fermions*

Betreuer: Michael Müller-Preußker (HU Berlin) und Hinnerk Stüben (ZIB)

**Technische Universität Berlin****Hans-Florian Geerdes** (Abt. Optimierung)*Capacity Improvements in TDMA-based Cellular Networks by Relaying and Flexible Transmission Scheduling*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Martin Kleinert** (Abt. Optimierung)*Primale Verbesserungsheuristiken für MIPs*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Ines Spenke** (Abt. Optimierung)*Umlaufplanung mit Längenrestriktionen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Adam Trepczynski** (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*Schnittmodellierung auf triangulierten Polygonoberflächen*

Betreuer: Heinz Lemke, Kai Köchy, Stefan Zachow (TU Berlin und ZIB)

## PRODUKTE

### 6.1 CodeLib

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von numerischen Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet “Scientific Computing”.

Weitere Informationen finden sich auf den Codelib Webseiten unter: <http://www.zib.de/SciSoft/CodeLib/>.

Schwerpunkt der Entwicklungs- und Pflegearbeiten war im Berichtszeitraum die Weiterentwicklung der KARDOS-Software zur Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen.

**Ansprechpartner:** Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

### 6.2 Amira

AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Geometrie-Rekonstruktion und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkern kann um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für viele Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren. Kooperationspartner des ZIB können die Software kostenfrei erhalten.

Eine professionelle End-User-Version mit einem ausgewählten Satz von Modulen sowie eine erweiterbare Entwickler-Version werden vom ZIB SpinOff Indeed - Visual Concepts GmbH entwickelt und kommerziell angeboten. Es werden die Betriebssysteme IRIX, SUN Solaris, HP-UX, Linux (Redhat und Suse) sowie Windows 9x, NT4, 2000, und XP unterstützt. Die derzeit aktuelle Version ist Amira 3.0, released im November 2002.

Daneben gibt es AMIRADEV, eine erweiterbare Version von AMIRA für programmierende Anwender, und AMIRAVR, eine Version zur Visualisierung in Virtual-Reality-Umgebungen. Erweiterungen zur Visualisierung molekularer Strukturen und zur visuellen Konformationsanalyse werden unter dem Namen AMIRAMOL angeboten. Module zur Entfaltung von Mikroskopbildern sind in der Erweiterung AMIRADECONV

zusammengefaßt.

Eine auf PC-Clustern lauffähige Version von AMIRA zum Betrieb von Displaysystemen, genannt AMIRACLUSTER, befindet sich in der Entwicklung und wird voraussichtlich im Laufe des Jahres 2003 verfügbar werden.

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

**Ansprechpartner:** Malte Westerhoff ([westerhoff@zib.de](mailto:westerhoff@zib.de)).

### 6.3 HyperPlan

HYPERPLAN ist eine fachspezifische Erweiterung des oben beschriebenen Softwaresystems AMIRA. Das System dient dazu, Hyperthermie-Behandlungen in der Krebstherapie computer-gestützt vor auszuplanen. *HyperPlan* enthält Komponenten zur Visualisierung, Modellerstellung, Simulation und Optimierung und integriert damit alle notwendigen Werkzeuge zur Erstellung von patientenspezifischen Behandlungsplänen.

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

**Ansprechpartner:** Detlev Stalling ([stalling@zib.de](mailto: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.

Eine Public-Domain-Weiterentwicklung von DOC++ wird bei Sourceforge angeboten ([docpp.sourceforge.net](http://docpp.sourceforge.net)). Das sehr erfolgreiche Tool Doxygen ([www.doxygen.org](http://www.doxygen.org)) beruht auch auf DOC++.

**Ansprechpartner:** Malte Westerhoff ([westerhoff@zib.de](mailto:westerhoff@zib.de)).

### 6.5 iTe

iTe ist ein intuitives und einfach zu benutzendes Tool zur Erstellung von  $\LaTeX$ - und  $\TeX$ -Dokumenten. iTe erlaubt es, beliebige Textfragmente wie Bilder, Gleichungen oder Beschriftungen zu selektieren und dann interaktiv zu verschieben, drehen und zu skalieren. iTe ist in die (X)Emacs-Editoren integriert und auf jedem Unix-System lauffähig. Unter <http://www.zib.de/Visual/software/ite> ist die aktuel-

le 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 berechnete Sichten auf Datensätze zur Verfügung, so daß auf Untermengen oder abgewandelte Daten zugegriffen werden kann, ohne die zugrundeliegenden Datensätze zu kopieren. Durch die Verwendung moderner Template-Techniken wird dabei eine besonders hohe Flexibilität in der Anwendung ermöglicht. VTL ist frei erhältlich (<http://www.zib.de/weiser/vtl/>).

**Ansprechpartner:** Martin Weiser (weiser@zib.de)

## 6.7 SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplex Verfahrens. Es beinhaltet sowohl primale wie duale Lösungsroutinen und ist als C++ Klassenbibliothek implementiert.

SoPlex kann als Unterroutine in anderen Programmen, wie 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* (Report 96-09) entwickelt.

Der Code wird derzeit ständig gewartet und weiterentwickelt. Weitere Informationen finden sich unter <http://www.zib.de/Optimization/Software/Soplex>.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch (koch@zib.de)

## 6.8 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), 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 Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der aktuellen REDUCE Version 3.7.

**Ansprechpartner:** Winfried Neun (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. Rebeck)
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 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.*

**Verfügbar:** <http://www.zib.de/koepf>

**Ansprechpartner:** Wolfram Koepf (koepf@zib.de)

## C Maple

FPS	D. Gruntz, W. Koepf: <i>Ein Maple Package für die Behandlung von Differentialgleichungen und symbolischen Potenzreihen.</i> Es ist ferner Teil der share library ab Maple Version V.3.
summation	W. Koepf, G. Stölting: <i>Ein Maple Package für die symbolische Summation.</i> Es ist ferner Teil der share library ab Maple Version V.4.
sumtools	W. Koepf: <i>Eine Maple Library für die symbolische Summation.</i> Die Library ist Teil von Maple Version V.4.
hsum.mpl	W. Koepf: <i>Ein Maple Package zum Buch: Hypergeometric Summation. An Algorithmic Approach to Hypergeometric Summation and Special Function Identities.</i>
qsum.mpl	H. Böing: <i>Eine Maple Library für die q-hypergeometrische Summation.</i>

**Verfügbar:** <http://www.zib.de/koepf>

**Ansprechpartner:** Wolfram Koepf (koepf@zib.de)

## 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/gatermann>

**Ansprechpartner:** Karin Gatermann ([gatermann@zib.de](mailto:gatermann@zib.de))

## 6.9 DISCNET

Am Konrad-Zuse-Zentrum wurde von 1994–2001 die Software DISCNET entwickelt, welche seitdem vorrangig von der Firma atesio, einem Spin-Off des ZIB, fortentwickelt wird. DISCNET ist ein Optimierungskern bestehend aus einer Vielzahl mächtiger Modelle und Algorithmen zur Konfiguration, Planung und Optimierung von Kommunikationsnetzen. Die für DISCNET entwickelte Mathematik wurde mit dem Mannesmann Innovationspreis 2001 ausgezeichnet und erlaubt es unseren Projektpartnern seit nun fast 10 Jahren ihre Netze qualitativ hochwertiger bei minimalen Kosten zu planen. In der Anwendung beim Betreiber konnten Kosteneinsparungspotentiale von 30 Prozent und mehr aufgezeigt werden. Referenzen sind Betreiber wie der DFN, E-Plus, Telekom Austria, und T-Systems Nova für so technologisch verschiedene Netze wie IP/OSPF-, PDH-, SDH-, WDM-, oder auch Mietleitungsnetze.

**Ansprechpartner:** Roland Wessäly ([wessaely@zib.de](mailto:wessaely@zib.de))

## 6.10 Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale

- **KOBV-Suchmaschine**

Unter der WWW-Adresse <http://search.kobv.de/> wird seit November 1999 die KOBV-Suchmaschine des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) bereitgestellt, die im Rahmen des KOBV-Projektes am ZIB entwickelt wurde. Im November 2001 wurde die zweite Version der KOBV-Suchmaschine mit erweiterten und verbesserten Web-Funktionalitäten zunächst zur Probe, Ende 2002 im Routinebetrieb eingesetzt. Oberfläche und Navigation dieser Version hat die KOBV-Zentrale verbessert und vereinfacht und am 25. November 2002 in Betrieb genommen. Mit Hilfe der KOBV-Suchmaschine können Nutzer über das WWW in allen Universitäts- und Fachhochschulbibliotheken der Region, in der Staatsbibliothek zu Berlin, in vielen Spezialbibliotheken, in den öffentlichen Bibliotheken Berlins und Brandenburgs und – über die Region hinaus – in allen deutschen Bibliotheksverbänden recherchieren. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig weiter ausgebaut und neue Bibliotheken werden in den Service eingebunden.

**Ansprechpartner:** Hildegard Franck ([franck@zib.de](mailto:franck@zib.de)), Renate Kraft ([kraft@zib.de](mailto:kraft@zib.de)), Monika Kuberek ([kuberek@zib.de](mailto:kuberek@zib.de)), Monika Lill ([lill@zib.de](mailto:lill@zib.de)), Stefan Lohrum ([lohrum@zib.de](mailto:lohrum@zib.de)), Beate Rusch ([rusch@zib.de](mailto:rusch@zib.de))

- **KOBV-Verbund (Index)**

Über die KOBV-Suchmaschine <http://search.kobv.de/> 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), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Bibliothekenführer**

Unter der WWW-Adresse <http://search.kobv.de/bibinfo.html> stellt die KOBV-Zentrale seit 17. Januar 2002 den KOBV-Bibliothekenführer bereit. Er ist als Gesamtverzeichnis der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken konzipiert, an dem sich alle regionalen Bibliotheken beteiligen können. Jede Bibliothek hat einen Eintrag im Bibliothekenführer, den sie selbst über eine Web-Schnittstelle aktualisieren kann. Die Bibliotheken pflegen den Bibliothekenführer gemeinschaftlich; die Koordination liegt bei der KOBV-Zentrale. Mit Hilfe des KOBV-Bibliothekenführers können Nutzer nun im WWW auch nach regionalen Bibliotheken suchen. Dabei werden sie durch vielfältige Suchmöglichkeiten unterstützt: anklickbare Karte, Suche nach Stichwörtern aus dem Namen oder auch fachliche Suche nach Bibliotheken mit bestimmten Fächerschwerpunkten.

**Ansprechpartner:** Hildegard Franck (franck@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **Fremd- und Normdatenserver**

Zur gemeinsamen Nutzung durch die KOBV-Bibliotheken hat die KOBV-Zentrale den Fremd- und Normdatenserver aufgebaut. Er enthält die folgenden bibliographischen Daten: Deutsche Nationalbibliographie (DNB) seit 1986 (Reihen A, B, H, M, N, T), sämtliche Reihen der Library of Congress (LOC) ab 1968, den Gesamtbestand des Verbundkataloges maschinenlesbarer Katalogdaten deutscher Bibliotheken (Retro-VK) und die Titeldaten der Zeitschriftendatenbank (ZDB). Darüber hinaus enthält er die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND), Schlagwortnormdatei (SWD). In 2002 wurde der Bestand an Fremddaten mit dem Einspielen der LOC-Daten und des Retro-VK beträchtlich erweitert. Die Daten werden – außer für den Retro-VK, der abgeschlossen ist – wöchentlich aktualisiert. 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), Renate Kraft (kraft@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Internes ZACK-Gateway**

Das im Rahmen einer Diplomarbeit während des KOBV-Projektes entwickelte WWW-Z39.50-Gateway ZACK ermöglicht von der Kommandozeile ausgehend einen verteilten Zugriff (mit Dublettenkontrolle) auf Bibliotheksdatenbanken, die über das Z39.50 Protokoll ansprechbar sind. Als Rechercheergebnis werden strukturierte Datensätze geliefert, die per Knopfdruck in das jeweilige Bibliothekssystem übernommen werden können (Copy Cataloging). Im KOBV wird das System insbesondere von Bibliotheken genutzt, die keinen Z39.50-Client haben. Die KOBV-Zentrale baut das KOBV-Interne ZACK-Gateway kontinuierlich aus und hat – neben frei zugänglichen Datenbanken – auch die vom KOBV lizenzierten Datenbanken eingebunden. Aus diesem Grund ist das KOBV-Interne ZACK-Gateway nur für KOBV-Mitgliedsbibliotheken zugänglich.

**Ansprechpartner:** Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Hotline**

Unter der E-Mail-Adresse [kobv-zt@zib.de](mailto: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](mailto: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:** Elke Durek (durek@zib.de), Hildegard Franck (franck@zib.de), Lavinia Hodoroba (hodoroaba@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), Raluca Rascanu (rascanu@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

- **KOBV-Informationsserver**

Unter der WWW-Adresse <http://www.kobv.de> wird das zentrale WWW-Informationsangebot zum Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) angeboten und ständig aktuell gehalten. Die Web-Seiten erhielten 2002 ein völlig neues Design und eine völlig neue, übersichtlichere Struktur.

**Ansprechpartner:** Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

## 6.11 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](mailto:dalitz@zib.de)), Winfried Neun ([neun@zib.de](mailto:neun@zib.de)), Wolfram Sperber ([sperber@zib.de](mailto:sperber@zib.de))

## 6.12 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 Mathe-*

*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 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)

### 6.13 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)

### 6.14 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 Bericht ZR-00-33 vor, aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.zib.de/schintke/ldasim/>.

**Ansprechpartner:** Florian Schintke (schintke@zib.de)

## VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON ZIB-MITARBEITERN

### 7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

#### **Tobias Achterberg**

**02.12.2002** *Variable Selection Strategies in Branch-and-Cut*  
Graduiertenkolleg “Combinatorics, Geometry and Computation”, Berlin

#### **Daniel Baum**

**24.05.2002** *Visualization Techniques in Molecular Drug Design*  
VisMath 2002, Berlin (zusammen mit Johannes Schmidt-Ehrenberg)

#### **Wolfgang Baumann**

**04.10.2002** *HLRN - High Performance Scientific Computing in North Germany*  
Eingeladener Vortrag am Shanghai Supercomputer Center, Jiao Tong University, China

**08.10.2002** *High Performance Scientific Computing in CFD*  
Eingeladener Vortrag, Computational Fluid Dynamics in the Scope of Engineering and Scientific Applications - CFD SESA 2002, Shanghai Jiao Tong University, China

#### **Werner Bengler**

**03.06.2002** *Relativitätstheorie in Bild und Ton - 85 Jahre nach Einstein*  
Vortrag vor dem Astronomischen Verein Südtirol

**23.06.2002** *Bizarre Bilder aus der Welt der Relativitätstheorie*  
Vortrag vor dem Universitätsclub Innsbruck

**04.07.2002** *Präsentation von interaktiven Visualisierungen in der Allgemeinen Relativitätstheorie am Immersadesk des AEI*  
Sommeruniversität Potsdam

**08.09.2002** *Interaktive Visualisierungen in der Allgemeinen Relativitätstheorie*

Tag der Offenen Tür am Max-Planck-Campus, Golm

**15.10.2002** *Interaktive Visualisierungen in der Allgemeinen Relativitätstheorie*  
Besuch der Arbeitsgruppe von Prof. Kim der FH Brandenburg

**07.11.2002** *BLIND DATE - Art meets Science*  
Kunstprojekt "Event Horizon" im Kutschstall, Am Neuen Markt, Potsdam, in Zusammenarbeit mit der Berliner Videokünstlerin Susanne Weirich sowie Nils Dorband und Ian Kelly vom AEI; im Auftrag des Brandenburgischen Kunstvereines

**12.11.2002** *Der Begriff "Schwarzes Loch" im Zusammenhang mit dem Bundeshaushalt*  
ZDF, Politmagazin Frontal 21

**04.12.2002** *Tensorfield visualization*  
Vortrag im Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm

### **Andreas Bley**

**18.03.2002** *Network Planning with Guarantees*  
23. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis: Mathematik in der Telekommunikation, Bad Honnef

**09.07.2002** *Polyhedral Methods for IP Network Optimization*  
16th Conference of the International Federation of Operations Research Societies, University of Edinburgh, Edinburgh, Großbritannien

### **Ralf Borndörfer**

**26.02.2002** *Umlauf- und Dienstplanoptimierung im Nahverkehr*  
Magdeburger Verkehrsbetriebe, Magdeburg

**10.03.2002** *Das BMBF-Portal "Math & Industry"*  
IuK 2002, Universität Ulm, Ulm

**21.03.2002** *Optimization in Public Transport*  
IVU Partner Meeting "Public Transport", IVU, Berlin

**13.08.2002** *Optimierung mit MICROBUS*  
Workshop DB Regio, IVU, Berlin

### **Manfred Brandt**

**03.09.2002** *On the Moments of the Overflow and Freed Carried Traffic for the GI/M/C/0 System*  
Operations Research 2002, Klagenfurt, Österreich



**Maren Brodersen****04.11.2002** *Metadaten im KOBV*

KOBV-Workshop “KOBV-Informationsportal – Konzepte und Realisierungsmöglichkeiten”, ZIB, Berlin

**Sven Burger****28.06.2002** *Josephson Effect in Bose-Einstein condensates*

Workshop ‘Controlled interaction in low-dimensional nanostructures’, Universität Stuttgart

**07.10.2002** *Selbst-adaptive Simulation von Strukturen aus photonischen Kristallen*

Statusseminar BMBF-Verbundprojekt „HiPhoCs“, Berlin

**Hubert Busch****25.4.2002** *Bericht zum Stand des HLRN; Gemeinsames entferntes SAN – Tests mit einer FiberChannel-Kopplung*

Vorträge anlässlich des 17. Treffen des Arbeitskreises “Supercomputing” im ZKI bei der Max-Planck-Gesellschaft, Garching

**01.10.2002** *Leiden des jungen HLRN – Aus dem Tagebuch einer Beschaffung*

Vortrag anlässlich der ZKI-Herbsttagung 2002 an der TU Dresden

**Wolfgang Dalitz****10.03.2002** *Internationalisierung: CEIC und ICM2002*

IuK-Tagung, Ulm

**10.03.2002** *X-Harvest und HyREX als Nachfolger von Harvest/Glimpse*

IuK-Tagung, Ulm

**17.09.2002** *Der Math-Net Navigator 2002*

DMV-Jahrestagung 2002, Halle/Saale

**Peter Deuffhard****14.02.2002** *Eine adaptive Innere-Punkt-Methode im Funktionenraum für Probleme der optimalen Steuerung*

Mathematisches Kolloquium, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH, Aachen

**26.06.2002** *The Smile of the Mathematician*

Conference on Scientific Computation, Université de Genève, Schweiz

**18.10.2002** *Von der Moleküldynamik zur Konformationsdynamik im rechnergestützten Entwurf von Medikamenten*

Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften

**15.11.2002** *From Molecular Dynamics to Conformation Dynamics in the Virtual Drug Design Lab*

CIMMS Workshop on Molecular Modeling and Computation, California Institute of Technology, CA, USA

**18.11.2002** *Virtual Lab for Computer Assisted 3D-Preoperative Planning*

Symposium "Biomechanics and Biology of Bone Healing", Charité, Humboldt-Universität zu Berlin

#### **Elke Durek**

**04.11.2002** *Klassifikation des Zugriffs auf lizenzierte/freie Materialien*

KOBV-Workshop "KOBV-Informationsportal – Konzepte und Realisierungsmöglichkeiten", ZIB, Berlin

#### **Klaus Ehrhardt**

**04.03.2002** *Nichtlineare Optimierungsmodelle für die Lastverteilung in Erdgasnetzen*

BMBF-Workshop Energie- und Finanzwirtschaft, ZIB, Berlin

**20.11.2002** *Optimierung des Gastransportes in Pipelinesystemen*

Seminarvortrag: Gerhard Mercator Universität Duisburg

**21.11.2002** *Optimierung des Gastransportes in Pipelinesystemen*

GOR Symposium: Versorgungswirtschaft und mathematische Methoden, Bad Honnef

#### **Andreas Eisenblätter**

**12.03.2002** *Frequency Assignment in GSM Networks: Models, Heuristics, and Lower Bounds*

6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

**12.03.2002** *Load Balancing in Signaling Transfer Points using CPLEX*

6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

**18.03.2002** *Standortauswahl und Konfiguration von UMTS Basisstationen*

23. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis: Mathematik in der Telekommunikation, Bad Honnef

**02.09.2002** *Frequenzzuweisung in GSM-Mobilfunknetzen: Modelle, Heuristiken und untere Schranken*

Operations Research 2002, Klagenfurt, Österreich

**10.09.2002** *Demand-Driven UMTS Radio Network Dimensioning*

AIRO 2002: 33rd Annual Conference of the Operational Research Society of Italy, L'Aquila, Italien

**19.09.2002** *Demand-Driven UMTS Radio Network Dimensioning*  
COST 273, Lissabon, Portugal

**Bodo Erdmann**

**18.07.2002** *Efficient and Reliable Finite Element Methods for Simulation of the Human Mandible.*  
Posterpräsentation, 9th Workshop on The Finite Element Method in Biomedical Engineering, Biomechanics and Related Fields, Universität Ulm

**Hans-Hermann Frese**

**22.08.2002** *Early experiences with the IBM SP Switch-2 on a distributed pSeries 690 cluster*  
ScicomP 6, Berkeley, Kalifornien, USA

**03.12.2002** *Der neue Höchstleistungsrechner Nord (HLRN) am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)*  
Freie Universität Berlin, Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung (ZEDAT)

**Tobias Galliat**

**10.07.2002** *Die Lösung des SAT-Problems mittels DNA-Computing*  
Disputationsvortrag am Fachbereich Mathematik und Informatik, FU Berlin

**Martin Grötschel**

**08.01.2002** *On Cycles in Matroids*  
Workshop „Combinatorics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

**12.02.2002** *Math&Industry – ein Projektüberblick*  
Treffen zum BMBF-Projekt „Math&Industry“, Heidelberg

**14.02.2002** *Graph Coloring and Frequency Assignment*  
Simon Fraser University, Burnaby, BC, Kanada

**14.02.2002** *Mathematical Opportunities in Telecommunication*  
Mekler-Lecture, Simon Fraser University, Burnaby, BC, Kanada

**17.02.2002** *Math-Net: State of the Art*  
Fourth Annual CEIC Meeting and Workshop, Vancouver, 15.–17. Februar, 2002

**20.02.2002** *Assigning Channels in Mobile Phone Systems: Which Approaches Work?*  
Distinguished Speaker Series in High Performance Computation for Engineered Systems, MIT, Cambridge, USA

**21.02.2002** *Combinatorial Online Optimization*  
Operations Research Center, MIT, Cambridge, USA

- 26.04.2002** *Initiative “Public Library of Science”*  
Tagung „Digitales Urheberrecht“, Heinrich-Böll-Stiftung, Berlin
- 06.05.2002** *Färbungsprobleme und Anwendungen*  
Institut für Informatik, Universität Bonn
- 11.05.2002** *Information und Kommunikation in der Mathematik: Math-Net, etc.*  
KMathF-Plenarversammlung, Göttingen
- 13.05.2002** *Was gibt es Neues in der Online-Optimierung?*  
Forschungsseminar über Quantitative Methoden in der Ökonomie, Institut für Operations Research, Universität Zürich, Schweiz
- 15.05.2002** *Mathematik: Schlüsselwissenschaft für die Informationstechnik*  
Ausstellungseröffnung im SiemensForum München, München
- 25.05.2002** *Modellierung und Optimierung: die mathematische Sichtweise*  
Workshop der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften  
“Computergestützte Analyse evolutionärer Optimierungsprozesse in komplexen Strukturen”, Blankensee
- 07.06.2002** *A Paulo ad Leonhardum*  
Festveranstaltung zum 60. Geburtstag von Martin Aigner, ZIB Berlin
- 26.06.2002** *Optimierung am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik*  
SAP, Walldorf
- 26.06.2002** *Mathematical Problems in Telecommunication*  
ILOG-SAP-Workshop, Walldorf
- 03.07.2002** *Verkehrsoptimierung im Konrad-Zuse-Zentrum*  
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Berlin-Adlershof
- 10.07.2002** *Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*  
Plenary Lecture, SIAM 50th Anniversary Meeting, Philadelphia, USA
- 15.07.2002** *Describing Polyhedra by Polynomials*  
IBM Watson Research Center, Yorktown Heights, New York, USA
- 15.07.2002** *Combinatorial Online Optimization*  
IBM Watson Research Center, Yorktown Heights, New York, USA
- 25.07.2002** *Online Optimization: What’s that?*  
Meeting of the Technical Advisory Board, ILOG, Paris, Frankreich
- 17.08.2002** *Report on the Work of the Committee on Electronic Information and Communication (CEIC)*  
General Assembly of the International Mathematical Union, Shanghai, China
- 26.08.2002** *Can we make (mathematical) information (on the Web) more accessible?*  
International Congress of Mathematicians, Beijing, China

- 20.09.2002** *Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien*  
Festvortrag anlässlich der Verabschiedung von H.-J. Reiffen und H.-W. Trapp,  
Universität Osnabrück
- 25.09.2002** *Online and Real-Time Optimization: an Overview*  
Workshop on Online Optimization, ILOG, Paris, France
- 23.10.2002** *Karl der Große, PISA, Gödel und die Verkehrsoptimierung*  
Gödel Lecture, Österreichische Akademie der Wissenschaften, Wien, Österreich
- 20.11.2002** *Das DFG-Forschungszentrum "Mathematik für Schlüsseltechnologien:  
Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse": Ein Überblick*  
Eröffnung des DFG-Forschungszentrums, TU Berlin
- 26.11.2002** *Polynomials and Polyhedra*  
Workshop "Combinatorial Optimization", Mathematisches Forschungsinstitut  
Oberwolfach
- 11.12.2002** *Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien*  
Förderverein der Technologiestiftung Berlin
- 16.12.2002** *Der Internetdienst Math&Industry*  
BMBF-Statusseminar 2002 "Neue Mathematische Verfahren in Industrie und  
Dienstleistungen", BASF, Ludwigshafen

### **Hans-Christian Hege**

- 06.02.2002** *Building Virtual Laboratories*  
Graphics Seminar, Computer Graphics Laboratory, Departement Informatik,  
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz
- 25.02.2002** *Introduction to Visual Data Analysis*  
Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad  
Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien
- 26.02.2002** *Architecture of Virtual Laboratories*  
Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad  
Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien
- 27.02.2002** *Real Time Computer Graphics*  
Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad  
Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien
- 28.02.2002** *Visualization of Scalar Fields*  
Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad  
Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien
- 01.03.2002** *Visualization of Vector Fields*  
Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital, Universidad  
Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

- 18.06.2002** *Visual Data Analysis: Applications in Biomedicine*  
PARA'02 6th International Conference on Applied Parallel Computing, Espoo, Finland (invited talk)
- 22.06.2002** *Visualization and Supercomputing: From Atoms to Galaxies*  
ISC2002 17th International Supercomputer Conference, Heidelberg, invited talk (zusammen mit Hartmut Schirmacher und Detlev Stalling)
- 03.07.2002** *Biomedical Virtual Labs: from Molecules to Virtual Patients*  
ECMTB2002, Mathematical Modelling & Computing in Biology and Medicine, held in Milano, Italy (invited talk)
- 17.08.2002** *Dr. McCoy's Ultimate Imaging Device*  
ECMTB2002 Mathematical Modelling and Computing in Biology and Medicine, Panel Session 'Hot Problems in Biology and Medicine', Milano, Italy
- 17.08.2002** *The Mathematization of Medicine and Biology: Supporting Software*  
ICMS 2002 - International Congress of Mathematical Software Beijing, China (invited talk)
- 23.08.2002** *Virtual Laboratories for Science, Engineering and Medicine*  
Japan Korea Computer Graphics Conference 2002 (JKCGC2002) (invited talk)
- 27.08.2002** *Virtual Laboratories for Physical Sciences*  
Research Institute for Information Science and Engineering, Hiroshima University, Japan
- 30.08.2002** *Virtual Laboratories in Science*  
Earth Simulator Center, Yokohama, Japan
- 17.09.2002** *Data Visualization in Science: from Atoms to Galaxy Clusters*  
IAMG 2002 Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology (keynote talk)
- 06.11.2002** *Introduction to Scientific Visualization*  
The German Film School for Digital Production, Elstal bei Berlin
- 13.11.2002** *Supercomputing und Visualisierung*  
Einweihung des HLRN-Rechners, Hannover, Deutscher Pavillon der Expo 2000, (mit 3D-Demo durch André Merzky)
- 15.11.2002** *Visualization of Scalar- und Vector-Fields*  
The German Film School for Digital Production, Elstal bei Berlin
- 20.11.2002** *Das Lächeln des Mathematikers: Operationsplanung am virtuellen Patienten*  
Eröffnungsfeier des DFG-Forschungszentrums "Mathematik für Schlüsseltechnologien", TU Berlin
- 29.11.2002** *Applications of Scientific Visualization*  
Studenten der German Film School, im ZIB (zusammen mit Olaf Paetsch)

- 07.12.2002** *Applications of Mathematical Visualization*  
Mini-Workshop “Mathematical Visualization”, TU Berlin

### Lavinia Hodoroaba

- 30.04.2002** *Navigation und Suche über heterogene Ressourcen*  
KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin
- 04.11.2002** *Die Navigation im kooperativen Portal inkl. Vorführung eines KOBV-Prototypen*  
KOBV-Workshop “KOBV-Informationsportal – Konzepte und Realisierungsmöglichkeiten”, ZIB, Berlin

### Ralf Kähler

- 25.09.2002** *Network Intensive Grid Computing and Visualization*  
iGrid 2002, Amsterdam, Niederlande (zusammen mit A. Merzky, T. Radke)
- 31.10.2002** *Rendering The First Star in the Universe*  
IEEE Visualization 2002, Boston, USA

### Bernd Kallies

- 09.–11.05.2002** *Coupling of Solvent and Solute Dynamics - Molecular Dynamic Simulations of Aqueous Urea Solutions*  
Bunsentagung, Potsdam
- 04.–09.08.2002** *Electronic Structure of  $3d[M(H_2O)_6]^{3+}$  and  $[M(H_2O)_5 OH]^{2+}$  Ions from  $Sc^{III}$  to  $Fe^{III}$  as Described by Natural Localized Orbitals*  
 $6^{th}$  World Congress of Theoretically Oriented Chemists - WATOC, Lugano, Switzerland

### Gunnar W. Klau

- 07.02.2002** *Ein kombinatorischer Ansatz für orthogonale Platzierungsprobleme*  
Mathematisches Kolloquium der Institute der Mathematik der Technischen Universität Braunschweig
- 27.02.2002** *A Combinatorial Approach to Orthogonal Placement Problems*  
ZIB, Berlin
- 16.04.2002** *Human-Guided Tabu Search*  
Local Search Workshop der Operational Research Society, London, Großbritannien
- 03.09.2002** *A Combinatorial Approach to Orthogonal Placement Problems*  
Operations Research 2002, Klagenfurt, Österreich

**04.09.2002** *Human-Guided Tabu Search*

Operations Research 2002, Klagenfurt, Österreich

**25.11.2002** *Planung und Konfiguration der Funkschnittstelle in UMTS-Netzwerken*

Forschungsaufenthalt beim Institut für Computergraphik und Algorithmen, Technische Universität Wien, Österreich

**02.12.2002** *Landkartenbeschriftung und andere schöne kombinatorische Optimierungsprobleme*

4th Siemens Workshop on Applied Discrete Optimization, Nördlingen

**Arie M. C. A. Koster****10.01.2002** *Load-balancing in Signaling Transfer Points*

6th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

**22.02.2002** *TACO: State of the art*

1st Meeting NWO-Projekt "Treewidth and Combinatorial Optimization", Institute of Information and Computing Sciences, Utrecht University, Utrecht, Niederlande

**11.03.2002** *Cost-efficient Design of Optical Networks I: Dimensioning and Routing*

6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, Florida, USA

**12.03.2002** *Frequency Assignment – Models and Algorithms (Disseration Award competition)*

6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, Florida, USA

**19.07.2002** *Minimum Converter Wavelength Assignment in Optical Networks*

29. Berliner Algorithmentag (BAT), FU Berlin

**10.09.2002** *Wavelength Assignment in Optical Networks*

AIRO 2002: 33rd Annual Conference of the Operational Research Society of Italy, L'Aquila, Italien

**04.12.2002** *TOL: A C++ Library for Treewidth and Optimization*

3rd Meeting NWO-Projekt "Treewidth and Combinatorial Optimization", Institute of Information and Computing Sciences, Utrecht University, Utrecht, Niederlande

**Sven Krumke****06.01.2002** *How to Cut a Cake Almost Fairly*

13th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, San Francisco, USA

**06.01.2002** *The Mathematics of Playing Golf*

13th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, San Francisco, USA



**11.01.2002** *Fair Division*

Gastvortrag am Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA

**11.03.2002** *Online Optimierung*

Gastvortrag im Graduiertenkolleg “Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften”, Berlin

**23.04.2002** *Hättest Du das nicht früher sagen können? (Warum Online-Optimierung schwierig ist)*

Gastvortrag Universität Duisburg

**13.06.2002** *Budgeted Maximum Graph Coverage*

28th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Cesky Krumlov, Tschechische Republik

**03.07.2002** *Non-Abusiveness Helps: An  $O(1)$ -competitive Algorithm for Minimizing the Maximum Flow Time in the Online Traveling Salesman Problem*

Dagstuhl-Seminar “Online Algorithms”, Schloß Dagstuhl

**26.09.2002** *Modeling, Analysis, and Simulation of Online-Problems*

ILOG Workshop on Online-Optimization, Paris, Frankreich

**03.10.2002** *Combinatorial Online Optimization*

Eingeladener Vortrag beim Symposium “Diskrete Mathematik 2002” der Deutschen Mathematiker Vereinigung, Dresden

**09.11.2002** *Restricted Adversaries for Online Computation*

Learn- & Workshop “Markov Chain Monte-Carlo Methods”, HU Berlin

**19.11.2002** *Online Optimierung*

Gastvortrag im Kolloquium der Universität Cottbus

**Monika Kuberek****18.01.2002** *Die KOBV-Suchmaschine – Version 2 (MetaLib)*

Aleph-DACH-Tagung vom 17.–18. Januar 2002, Zürich, Schweiz

**30.01.2002** *Vorstellung des KOBV auf dem Weg zum regionalen Portal*

Vortrag auf Einladung der Bibliotheken der obersten Bundesbehörden im Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie, Berlin

**06.03.2002** *Der KOBV – Aufbau, Struktur, Aufgaben*

Besuch von Bibliothekaren und EDV-Spezialisten der Universität Bratislava in der KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin

**30.04.2002** *Stand der Überlegungen zum KOBV-Portal aus dem Unterausschuß KOBV-Informationportal*

KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin

**30.04.2002** *Aufbau von Diensten – Fernleihe*

KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin

**29.07.2002** *KOBV – The Cooperative Library Network of Berlin and Brandenburg*

Besuch der ungarischen Aleph-User-Group in der KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin

**Hans Lamecker****21.06.2002** *Preoperative Planning for Liver Surgery*

Robert-Rössle Klinik, Berlin-Buch

**27.09.2002** *A Statistical Shape Model for the Liver*

MICCAI 2002, Tokyo, Japan

**29.11.2002** *3D-Patientenmodelle für die Hyperthermieplanung*

Besuch einer internationalen Postdoc Gruppe der TFH Wildau, ZIB

**Monika Lill****30.04.2002** *Zeitschriften: Eine Service-Lücke im KOBV?*

KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin

**29.06.2002** *KOBV-Search Engine – Version 2*

Besuch der ungarischen Aleph-User-Group in der KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin

**Stefan Litsche****18.02.2002** *Kurzvorstellung der evaluierten Systeme MetaLib, IPS und Elektra*

Interne KOBV-Informationsveranstaltung, ZIB, Berlin

**18.02.2002** *Die evaluierten Systeme im Vergleich*

Interne KOBV-Informationsveranstaltung, ZIB, Berlin

**18.02.2002** *Dynamic Linking Systeme – Kurzvorstellung der Systeme: MetaLib/SFX, IPS/Verfügbarkeitsrecherche*

Interne KOBV-Informationsveranstaltung, ZIB, Berlin

**30.04.2002** *Verteilte Zugriffskontrolle – Problemanalyse und erste Modellvorstellungen*

KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin

**06.06.2002** *Open-Linking: Motivation und Möglichkeiten*

1. Treffen der AG der Verbünde zum Verteilten Zeitschriftenserver (VZS), ZIB, Berlin

**04.11.2002** *Verteilte Zugriffskontrolle – Möglichkeiten der Realisierung*

KOBV-Workshop “KOBV-Informationsportal – Konzepte und Realisierungsmöglichkeiten”, ZIB, Berlin

### **Stefan Lohrum**

**18.02.2002** *Auf dem Weg zum Portal – Einführung: Portalsysteme für Bibliotheken*  
KOBV-Informationsveranstaltung “Evaluation von Portalsystemen für Bibliotheken”, ZIB, Berlin

**11.04.2002** *Z39.50 Configuration*  
8th Exlibris System Seminar, Limassol, Zypern

**30.09.2002** *A System monitor for Aleph/MetaLib processing on Unix machine*  
13th Annual ICAU Meeting, University of Paris IV, Paris, Frankreich

**03.10.2002** *A hook to external programs for the MetaLib access protocol*  
1st SFX/Metalib Users Group Meeting, University of Paris IV, Paris, Frankreich

### **Joachim Lügger**

**25.01.2002** *Konzeption einer universellen Suchmaschine für verteilte digitale Ressourcen im Bibliotheksbereich*  
2. Treffen der AG Wissenschaftssuchmaschine; Stadtbibliothek Frankfurt am Main

**18.02.2002** *Auf dem Wege zum KOBV-Informationsportal*  
Interne KOBV-Informationsveranstaltung, ZIB, Berlin

**21.02.2002** *Modellvorstellung eines Verteilten Dokumentenspeichers im KOBV*  
Arbeitsgemeinschaft der deutschen Verbundsysteme; Hochschulbibliothekszentrum NRW, Köln

**10.04.2002** *Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) – Von der Suchmaschine zum kooperativen Portal*  
92. Deutscher Bibliothekartag in Augsburg

**30.04.2002** *Ein verteilter Dokumentenspeicher im KOBV*  
KOBV-Workshop “Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen”, ZIB, Berlin

**06.06.2002** *Ein Verteiltes Dokumentenarchiv*  
1. Treffen der Arbeitsgruppe “Verteilter Zeitschriftenserver” der Arbeitsgemeinschaft der deutschen Verbundsysteme, ZIB, Berlin

**06.08.2002** *Modellvorstellung eines Verteilten Dokumentenarchivs*  
Bayerische Staatsbibliothek, München

**26.09.2002** *Verteilter Zeitschriftenserver – Statusbericht und Rahmenplan*  
2. Treffen der Arbeitsgruppe “Verteilter Zeitschriftenserver” der Arbeitsgemeinschaft der deutschen Verbundsysteme, Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt am Main

**21.10.2002** *KOBV-Suchmaschine und Suche im Museumsbereich*

Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, ZIB, Berlin

**22.11.2002** *KOBV-Informationsportal und Verteilter Dokumentenspeicher des KOBV*

Internes Treffen "Wissenschaftssuchmaschine" der Universitätsbibliothek Bielefeld, Bielefeld

**20.12.2002** *Der Verteilte Zeitschriftenserver – Statusbericht*

Bayerische Staatsbibliothek, München

**Sascha G. Lukac****14.05.2002** *Der mittlere Abstand in quadratischen Gittern*

Mitarbeitervortrag, ZIB, Berlin

**09.12.2002** *Mathematische Ansätze im Bahnverkehr*

Institut für Land- und Seeverkehr, TU-Berlin

**Frank Lutz****10.04.2002** *Fast enumeration of combinatorial manifolds with few vertices*

Konferenz "On the Border of Geometry and Topology", Bedlewo, Polen

**17.08.2002** *Fast enumeration of combinatorial manifolds with few vertices*

Satellitenkonferenz des International Congress of Mathematicians (ICM 2002) "Discrete, Combinatorial and Computational Geometry", Peking University, Beijing, China

**16.09.2002** *Triangulierungen von geometrischen 3-Mannigfaltigkeiten*

Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Halle

**15.11.2002** *A series of nearly neighborly centrally symmetric 3-spheres with cyclic group action*

Kolloquium über Kombinatorik, Magdeburg

**06.12.2002** *Beinahe nachbarschaftliche zentralsymmetrische 3-Sphären mit zyklischer Gruppenwirkung*

Sächsischer Geometrietag 2002, Dresden

**Alexander Maye****25.11.2002** *Neuronal Correlates of Perception*

Neurobiologie, FU Berlin

**06.12.2002** *Neuronale Synchronität, zeitliche Bindung und Wahrnehmung*

Workshop im VisionIC-Projekt, Elektrotechnik, TU Berlin

**Winfried Neun**

**10.03.2002** *Der neue Pagemaker: Konzept und Einsatz*

IuK-Fachgruppe der DMV/ÖMG, Ulm

**11.03.2002** *Standardized Portals for Mathematical Institutions*

IuK-Tagung 2002, Ulm

**17.09.2002** *MathML*

DMV-Jahrestagung 2002, Halle

**29.09.2002** *OpenMath in the Math-Net project*

OpenMath Workshop, Pisa, Italien

**07.11.2002** *Math-Net – the state of the art of a distributed information & communication system in mathematics*

elpub 2002, Karlovy Vary, Tschechien

**Ulrich Nowak**

**30.04.2002** *Numerical software for simulation, sensitivity analysis and parameter identification in catalytic gas reactors.*

2. International conference on advanced computational methods in engineering, Liege, Belgium

**Olaf Paetsch**

**3.12.2002** *Vorstellung und Einführung von AMIRA*

INPRO (Innovationsgesellschaft für fortgeschrittene Produktionssysteme in der Fahrzeugindustrie mbh), Berlin

**Diana Poensgen**

**14.06.2002** *Online Call Admission in Optical Networks with Larger Demands*

28th International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, Cesky Krumlov, Tschechische Republik

**03.07.2002** *Online Call Admission in Optical Networks with Larger Demands*

Dagstuhl Seminar "Online Algorithms", Dagstuhl

**02.12.2002** *Online-Optimierung und optische Netzwerke*

4th Siemens Workshop on Applied Discrete Optimization, Nördlingen

**Steffen Prohaska**

**12.03.2002** *Visualization and analysis of bone biopsies using amira*

Bone Jamboree, ESTEC/ESA, Nordwijk, Niederlande

**03.06.2002** *Visual Analysis of Trabecular Bone Structure*

European Symposium on “Life in Space for Life on Earth”, Karolinska Institutet, Stockholm, Sweden

**27.06.2002** *Analysis of Microvascular Networks*

Summer School on Massive Data Sets, BRICS, University of Aarhus, Dänemark

**02.07.2002** *Advances in 3D Visualization with amira*

Projekttreffen “2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity”, Siemens, Forchheim

**27.07.-02.08.2002** *Advanced Visualization with amira and amiraVR*

Training class, BP Center for Visualization, University of Colorado, Boulder, Colorado, USA

**30.10.2002** *Fast Visualization of Plane-Like Structures in Voxel Data*

IEEE Visualization 2002, Boston, USA

**18.11.2002** *Display and Handling of Large 3D Images for Analysis of Micro-Vascular Networks*

Workshop “Towards a Research Network on Imaging and Biomechanics of the Brain Microcirculation”, Toulouse, Frankreich

**Jörg Rambau**

**24.04.2002** *Der Flug der gelben Engel: Flottenmanagement von Hilfefahrzeugen in Echtzeit*

Seminar “Optimization”, Universität Duisburg

**28.05.2002** *Computing Triangulations Using Oriented Matroids*

Workshop “Mathematical Structures for Computable Topology and Geometry”, Schloß Dagstuhl

**18.08.2002** *TOPCOM: Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*

International Congress of Mathematical Software, Beijing, China

**18.11.2002** *Combinatorial Online-Optimization in Practice*

Workshop “Kombinatorische Optimierung”, Oberwolfach

**10.12.2002** *Der Flug der gelben Engel – Automatisches Dispatchen von ADAC-Fahrzeugen in Echtzeit*

Universität Kaiserslautern

**Alexander Reinefeld**

**19.06.2002** *Clusters and Grids: Past, Present, Future*

ISC Tutorial “Clusters & Grids: HPC Manufacturers’ Strategies”, Heidelberg

**22.06.2002** *Six Federal States, Two Sites, One Supercomputer in Northern Germany*

International Supercomputer Conference (ISC), Heidelberg

- 15.07.2002** *Concepts and Technologies in Cluster and Grid Computing*  
Colloquium for Particle Physics, Astrophysics and Cosmology, Universität Heidelberg
- 23.09.2002** *Perspectives in Grid Computing*  
Vortrag anlässlich der Verleihung des IBM Faculty Awards, Böblingen
- 04.10.2002** *Grids in the Broader Framework of Distributed Computing*  
DG INFSO/F2 Workshop, Brüssel, Belgien

### **Stefan Röhl**

- 01.03.2002** *Management verteilter Lager: Transportorganisation bei stochastischer Nachfrage*  
BMBF-Workshop Verkehr, Logistik und Energiewirtschaft, Frankfurt
- 07.05.2002** *Management verteilter Lager: Ansätze für ein stochastisches Modell*  
Forschungsseminar Institut für Operations Research, HU Berlin
- 08.11.2002** *Management verteilter Lager: Transportorganisation bei stochastischer Nachfrage*  
Forschungsseminar Algorithmische und Diskrete Mathematik, TU Chemnitz
- 29.11.2002** *Scheduling Trucks for Supply Management*  
ZIB Berlin

### **Oliver Rudzick**

- 18.02.2002** *Dynamische Verlinkung*  
Interne KOBV-Informationsveranstaltung, ZIB, Berlin

### **Beate Rusch**

- 12.03.2002** *Verwaltung von Ressourcen in der Portalsoftware MetaLib (I und II)*  
Software-Schulung für Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin
- 12.03.2002** *Überblick über die Funktionen der Portalsoftware MetaLib*  
Software-Schulung für Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin
- 19.03.2002** *Das Infogateway – Eine Funktion der Portalsoftware MetaLib*  
Software-Schulung für Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin
- 19.03.2002** *Autorisierung in der Portalsoftware MetaLib*  
Software-Schulung für Mitglieder der Humboldt-Universität zu Berlin
- 30.04.2002** *Zeitschriften: Eine Servicelücke im KOBV?*  
KOBV-Workshop "Inhalte des KOBV-Informationportals – Einstieg in gemeinsame Überlegungen", ZIB, Berlin
- 16.05.2002** *Der KOBV-Bibliothekenführer: Ein neuer Dienst*  
Besuch der Bibliotheksschule Frankfurt a.M. in der KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin

**10.07.2002** *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg*

Tagung "Digital Library - IT Opportunities and Challenges in the New Millennium" vom 09.-12.07.2002, Beijing, VR China

**13.07.2002** *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg*

Workshop des Goethe-Instituts in Hongkong, VR China

**15.07.2002** *Towards an Internet Based Information Portal for Berlin and Brandenburg*

Workshop der Guangzhou-Library in Kanton, VR China

**29.07.2002** *KOBV-Library WEB Guide: From the idea to the implementation*

Besuch der ungarischen Aleph-User-Group in der KOBV-Zentrale, ZIB, Berlin

### **Carlos Saro**

**21.10.2002** *Datenbanken im Internet – Konzeption und Realisierung*

Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, ZIB, Berlin

### **Frank Schmidt**

**07.04.2002** *Adaptive finite element methods for the solution of optical scattering problems*

10th International Workshop on Optical Waveguide Theory and Modelling, University of Nottingham, GB

**19.04.2002** *Eine adaptive Mehrgitter-Methode zur Lösung des Eigenwertproblems der Helmholtz- und der Maxwell'schen Gleichungen*

Seminar für Numerische und Angewandte Mathematik, Universität Göttingen

**25.06.2002** *Pole Condition: A New Approach to solve Scattering Problems*

Oberseminar des Instituts für Geometrie und praktische Mathematik, RWTH Aachen

**28.06.2002** *Pole Condition: A New Approach to solve Scattering Problems*

4th International SCEE-Workshop, Eindhoven, Niederlande

**12.07.2002** *Zur Mathematik Photonischer Kristalle*

Seminar Photonische Kristalle – Modellierung, Simulation und Technologie, ZIB, Berlin

### **Johannes Schmidt-Ehrenberg**

**24.05.2002** *Visualization Techniques in Molecular Drug Design*

VisMath 2002, Berlin (zusammen mit Daniel Baum)



**31.10.2002** *Visualizing Dynamic Molecular Conformations*  
IEEE Visualization 2002, Boston

### **Wolfram Sperber**

**16.02.2002** *Math-Net als Prototyp eines verteilten Informationssystems*  
Projekttreffen Math&Industry, Heidelberg

**29.08.2002** *Math-Net International and the Math-Net Page*  
Satellite Conference of ICM2002 “Electronic Information and Communication in Mathematics”, Beijing, VR China

**07.09.2002** *Semantic Web – und die Perspektiven wissenschaftlicher Informationssysteme am Beispiel des Math-Net*  
Kolloquium am Institut für Mathematik, BTU Cottbus

**17.09.2002** *Die Internationalisierung des Math-Net*  
DMV-Jahrestagung, Halle

**08.11.2002** *The Internationalization of Math-Net, the Math-Net Page and the Math-Net Page Navigator*  
SINN02, Oldenburg

**16.12.2002** *Der Internetdienst Math&Industry*  
Statusseminar Mathematikprogramm 2002, BASF, Ludwigshafen

### **Detlev Stalling**

**14.05.2002** *Visualizing flow fields in an immersive environment using AmiraVR*  
Flow Visualization Symposium am High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS)

**07.08.2002** *Image segmentation and 3D geometry reconstruction*  
Sommerschule Computational Visualization an der Universität Mannheim

### **Regine Stein**

**21.10.2002** *Datenbanken im Internet – Konzeption und Realisierung*  
Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, ZIB, Berlin

### **Marc Steinbach**

**09.01.2002** *Handling general information constraints in scenario-based stochastic programs*  
Forschungsseminar “Numerik stochastischer Modelle”, HU Berlin

**21.01.2002** *Controlling a distillation process by dynamic stochastic programming*  
International Conference on Optimization, Lambrecht

- 11.03.2002** *Solving stochastic programs with automatically generated sparse factorizations*  
IFIP/IIASA/GAMM Workshop on Dynamic Stochastic Optimization, Laxenburg, Österreich
- 17.04.2002** *Automatisch generierte Löser für dynamische stochastische Programme*  
Forschungsseminar "Numerik stochastischer Modelle", HU Berlin
- 15.–18.05.2002** *Forschungsaufenthalt bei Alexander Shapiro*  
Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA
- 16.05.2002** *Generating Sparse Factorization Code for Dynamic Stochastic Programs*  
Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA
- 21.05.2002** *Generating Sparse Factorization Code for Dynamic Stochastic Programs*  
SIAM Conference on Optimization, Toronto, Kanada
- 09.09.2002** *Custom Sparse Solvers for Multistage Stochastic Programs*  
French-German-Polish Conference on Optimization, Cottbus
- 17.09.2002** *Optimierung der Lastverteilung im Gasnetz: erste Resultate*  
DMV-Jahrestagung, Halle
- 02.–04.10.2002** *Forschungsaufenthalt bei Karl Frauendorfer*  
Universität St. Gallen, Schweiz
- 19.11.2002** *Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung: Zwischenbericht*  
BMBF-Projekttreffen, Ruhrgas AG, Essen
- 17.12.2002** *Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen*  
BMBF-Statusseminar, Ludwigshafen

### **Thomas Steinke**

- 27.09.2002** *Computational Requirements for Structure Prediction of Biomolecules*  
32nd Speedup Workshop on Life Science Applications, EPF Lausanne, Schweiz
- 31.10.2002** *BCB Linux-Cluster am ZIB*  
Schering AG, Berlin

### **Hinnerk Stüben**

- 27.11.2002** *Demonstration of a Typical HPC Application*  
Symposium on Grid Computing, Wissenschaftszentrum Bonn, 27.–28. November 2002

### **Luis Miguel Torres**

- 04.09.2002** *Online Dispatching of Automobile Service Units in Real Time*  
Operations Research 2002, Klagenfurt, Österreich

**19.09.2002** *Real-Time Dispatching of Guided and Unguided Automobile Service Units with Soft Time Windows*  
10th European Symposium on Algorithms, Rom, Italien

### **Brygg Ullmer**

**03.12.2002** *Giving Physical Form to Digital Information*  
School of Design, Hong Kong Polytechnic University Invited talk associated with five-week course.

### **Tjark Vredeveld**

**14.03.2002** *Local search for multiprocessor scheduling: how many moves does it take to a local optimum?*  
EIDMA Optimization Seminar, TU Eindhoven, Niederlande

**11.04.2002** *Approximating MaxCut*  
EIDMA Optimization Seminar, TU Eindhoven, Niederlande

**11.04.2002** *On local search for the generalized graph coloring problem*  
EIDMA Optimization Seminar, TU Eindhoven, Niederlande

**12.04.2002** *Performance guarantees of local search for multiprocessor scheduling*  
CentER Operations Research Seminar, Universität von Tilburg, Tilburg, Niederlande

**16.09.2002** *Performance guarantees of local search for multiprocessor scheduling*  
ZIB, Berlin

**19.12.2002** *Smoothed Competitive Analysis of the Multi-Level Feedback Algorithm*  
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

### **Annegret Wagler**

**07.01.2002** *How imperfect are certain graphs after deleting a critical edge?*  
6th International Workshop in Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

**10.07.2002** *Perfektheit ist eine elusive Grapheigenschaft*  
Kolloquium, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg

**12.09.2002** *How imperfect are Webs and Antiwebs?*  
AIRO 2002: 33rd Annual Conference of the Operational Research Society of Italy, L'Aquila, Italien

**15.11.2002** *How imperfect are Webs and Antiwebs?*  
Kolloquium über Kombinatorik, Magdeburg

**09.12.2002** *Perfectness is an Elusive Graph Property*  
Algorithmische Graphentheorie, Oberwolfach

**11.12.2002** *From Conjecture to Theorem: A Progress Report on the Strong Perfect Graph Conjecture*  
Algorithmische Graphentheorie, Oberwolfach

**Marcus Weber**

**15.11.2002-16.11.2002** *Posterbeitrag zur Konformationsanalyse*  
CIMMS-Tagung, Los Angeles, USA

**Steffen Weider**

**28.02.2002** *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV*  
BMBF Workshop Verkehr, Transport, Logistik und Energiewirtschaft, Frankfurt a. M.

**15.02.2002** *LP-based heuristics for the integrated vehicle and duty scheduling problem*  
28. Berliner Algorithmen Tag, TU Berlin

**06.03.2002** *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Nahverkehr*  
Heureka '02, Karlsruhe

**Martin Weiser**

**25.01.2002** *An Adaptive Function Space Interior Point Method for Optimal Control Problems*  
18th GAMM Seminar on Multigrid and related methods for optimization problems, MPI Leipzig

**28.01.2002** *Innere-Punkt-Methoden zur numerischen Lösung von Optimalsteuerungsproblemen*  
Universität Bayreuth

**08.04.2002** *Interior Point Methods for Optimal Control Problems*  
Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich

**11.06.2002** *Adaptive Function Space Interior Point Methods for Optimal Control Problems*  
Universität Dresden

**Roland Wessälly**

**21.01.2002** *Optimization in Telecommunications*  
Antragspräsentation des DFG-Forschungszentrums, DFG, Bonn

**12.03.2002** *A Component-Resource Model for the Design of Communication Networks*  
6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

**12.03.2002** *Load Balancing in Signaling Transfer Points Using CPLEX*  
Sixth INFORMS Conference on Telecommunications, Boca Raton, USA

**21.11.2002** *Wenn das Handy klingelt: Zur Mathematik des Telefonierens*  
Eröffnungsfeier des DFG-Forschungszentrums, TU Berlin, Berlin

### **Malte Westerhoff**

**23.07.2002** *3D Visualization: From Molecules to Immersion*  
Tech Talk at SIGGRAPH 2002, San Antonio (TX), USA

**28.08.2002** *Amira: An Object Oriented Approach to Visualization*  
Visualization Seminar at Sam Houston State University, Huntsville (TX), USA

**29.08.2002** *Amira: An Object Oriented System for Visualization and VR Applications*  
University of Houston, Houston (TX), USA

**30.08.2002** *Visualization and Deconvolution for Confocal Microscopy Data*  
Baylor College of Medicine, Houston (TX), USA

**04.10.2002** *Visualization in Immersive Environments*  
SGI CBC, San Francisco (CA), USA

**05.10.2002** *3D Image Segmentation and Medical Visualization*  
New York University Medical Center, New York City, USA

**05.10.2002** *Segmentation and Quantification in MRI Brain Data*  
NYU Neural Institute, NMR research Center, New York City, USA

**09.12.2002 und 10.12.2002** *Wissenschaftliche Visualisierung in der Forschung*  
Winterschule am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ), München

### **Stefan Zachow**

**13.06.2002** *Computer Assisted 3D Osteotomy Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery (Posterpräsentation)*  
16. Treffpunkt Medizintechnik: Kooperationen Wissenschaft – Wirtschaft, Charité - Campus Virchow Klinikum, Berlin

**21.06.2002** *Computer-assistierte 3D-Planung in der Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie*  
Eingeladener Vortrag mit *Round-Table* Diskussion, 7. Kongress der Union Schweizerischer Chirurgischer Fachgesellschaften, Lausanne, Schweiz

**26.06.2002** *Towards patient specific, anatomy based simulation of facial mimics for surgical nerve rehabilitation*  
6. Annual Conference of the International Society for Computer Aided Surgery (ISCAS/CARS), Paris, France

**28.06.2002** *3D Osteotomy planning in cranio-maxillofacial surgery: Experiences and results of surgery planning and volumetric finite-element soft tissue prediction in three clinical cases*

8. Computed Maxillofacial Imaging Congress (CMI/CARS), Paris, France

### **Lin Zschiedrich**

**05.04.2002** *Self Adaptive Finite Element Methods for the Computation of Guided Modes of Optical Waveguides*

10th International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modelling, University of Nottingham, GB

**24.06.2002** *Solving time-dependent Schrödinger equations on unbounded domains with the pole condition technique in comparison to PML*

Scientific Computing in Electrical Engineering, SCEE-2002 Eindhoven, Niederlande. Poster presentation

**14.11.2002** *Solving time harmonic scattering problems based on the pole condition*

Mathematical Physics and Computational Mechanics Informal Seminar, University Twente, Niederlande

### **Adrian Zymolka**

**08.01.2002** *Stable multi-sets*

6th International Workshop in Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

**11.03.2002** *Cost-efficient Design of Optical Networks II: Wavelength Assignment*

6th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

**29.04.2002** *On generalizations of set packing*

Kolloquium des Graduiertenkollegs, ZIB, Berlin

**02.12.2002** *Design of optical networks*

4th Siemens Workshop on Applied Discrete Optimization, Nördlingen

## **7.2 Vorlesungen und Seminare**

### **Wolfgang Baumann: TU Berlin**

**WS 2001/02** *Aktuelle Arbeitstechniken der Informations- und Kommunikationstechnik für Ingenieure (Integrierte Lehrveranstaltung)*

Mitveranstalter: F. Thiele

### **Ralf Borndörfer: TU Berlin**

**WS 01/02** *Analysis I für Ingenieure (ET) (Vorlesung)*

**SS 02** *Analysis II für Ingenieure (ET) (Vorlesung)*

**Manfred Brandt: HU Berlin**

**SS 02** *Geometrische Funktionentheorie* (Vorlesung)

**Frank Cordes: FU Berlin**

**SS 02** *Struktur und Funktion von Biomolekülen* (Vorlesung, Mitveranstalter: T. Steinke, ZIB)

**SS 02** *Moleküle im Rechner* (Seminar, Mitveranstalter: CH. Schütte und B. Schmidt, FU Berlin)

**26.6.2002** *Biomoleküle im Rechner* (Unternehmenswochen organisiert vom MINT Zentrum der FU Berlin)

**Peter Deuffhard: FU Berlin**

**SS 02** *Einführung in die Numerische Mathematik (Numerik I)* (Vorlesung/Übung)

**WS 01/02, SS 02** *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing* (Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), H. Gajewski (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), R. März (HU), C. Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

**WS 01/02, SS 02** *Seminar für Diplomanden und Doktoranden* (Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), C. Schütte (FUB))

**Karin Gatermann: FU Berlin**

**SS 02** *Chemische Reaktionssysteme* (Vorlesung)

**Martin Grötschel: TU Berlin**

**WS 01/02** *Computational Convexity* (Blockseminar)

**WS 02/03** *Ökonomische Modelle aus mathematischer Sicht* (Vorlesung)

**Hans-Christian Hege: Barcelona, Universidad Pompeu Fabra, Programa de Doctorado em Informática y Comunicación Digital**

**WS 2001/2002** *Algorithms for Visual Data Analysis* (Blockkurs)

**Sven Krumke: TU Berlin**

**WS 01/02** *Online Optimierung* (Vorlesung)

**WS 02/03** *Fortgeschrittene Datenstrukturen und Algorithmen* (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)

**SS 02** *Bibliothekarische Verbände* (Blockseminar im Studiengang Wissenschaftliche Bibliothekarin/Wissenschaftlicher Bibliothekar des Postgradualen Fernstudiums am Institut für Bibliothekswissenschaft der HU Berlin)

**Frank Lutz: TU Berlin**

**WS 01/02** *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)

**WS 01/02** *Computational Convexity* (Seminar)

**SS 02** *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

**WS 02/03** *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)

**Marc Pfetsch: TU Berlin**

**WS 02/03** *Lineare Algebra II* (Übung)

**Jörg Rambau: TU Berlin**

**WS 01/02** *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

**Jörg Rambau: Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador**

**WS 02/03** *Combinatorial Online-Optimization: Basic and Advanced Ingredients for a Project from Practice* (Blockvorlesung im Rahmen einer DAAD-Kooperation der TU Berlin mit Hochschulen in Entwicklungsländern)

**Alexander Reinefeld: HU Berlin**

**WS 01/02** *Mobile Computing* (Seminar)  
Mitveranstalter: F. Schintke (ZIB)

**18.–22.02.2002** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Praktikum)  
Mitveranstalter: H. Stüben (FU Berlin), W. Baumann (ZIB)

**SS 02** *Grid Computing* (Projektseminar)  
Mitveranstalter: F. Schintke (ZIB)

**23.–27.09.2002** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI* (Praktikum)  
Mitveranstalter: H. Stüben (FU Berlin), W. Baumann (ZIB)



**Marc Steinbach: TU Berlin**

**SS 02** *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

**WS 02/03** *Optimierung verfahrenstechnischer Prozesse* (DECHEMA-Weiterbildungskurs; in Zusammenarbeit mit Günter Wozny und Pu Li, TU Berlin, und René Henrion, WIAS)

**Thomas Steinke: FU Berlin**

**SS 02** *Struktur und Dynamik von Biomolekülen* (Vorlesung, Übungen)  
Mitveranstalter: F. Cordes (ZIB)

**Annegret Wagler: TU Berlin**

**SS 02** *Perfekte Graphen* (Vorlesung)

**WS 02/03** *Perfekte Graphen II* (Vorlesung)

### 7.3 Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

**Peter Deuffhard**

**26.09.2002** *Wissenschafts-Dialog*, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Arbeit und Frauen

**Andreas Eisenblätter**

**18.–19.03.2002** *23. Symposium des Arbeitskreises Mathematik in Forschung und Praxis: Mathematik in der Telekommunikation*, Bad Honnef

**Hans-Hermann Frese**

**20.–24.05.2002** *CUG SUMMIT 2002*, (Program Chair), Manchester, UK

**Karin Gatermann**

**25.–28.03.2002** *Sektion Computer Algebra and Computer Analysis der Jahrestagung der GAMM*, Augsburg

**31.08.–06.09.2002** *International workshop on Groups and Graphs der EWM*, Varna, Bulgarien

**Martin Grötschel**

**15.–17.02.2002** *CEIC Meeting*, Simon Fraser University, Vancouver, Kanada

**20.11.2002** *Feierliche Eröffnungsveranstaltung des DFG-Forschungszentrums "Ma-*

*thematik für Schlüsseltechnologien”, TU Berlin,*

**21.–22.11.2002** *Eröffnungsworkshop des DFG-Forschungszentrums “Mathematik für Schlüsseltechnologien”, TU Berlin,*

### **Sven Krumke**

**27.10.–28.10.2002** *Workshop “Future Research in Combinatorial Optimization”, Köln*

**25.10.–28.10.2002** *Sixth International Workshop on Discrete Algorithms and Methods for Mobile Computing and Communications, Atlanta, USA*

### **Joachim Lügger**

**06.06.2002** *1. Treffen der Arbeitsgruppe “Verteilter Zeitschriftenserver” der Arbeitsgemeinschaft der deutschen Verbundsysteme, ZIB, Berlin*

**26.09.2002** *2. Treffen der Arbeitsgruppe “Verteilter Zeitschriftenserver” der Arbeitsgemeinschaft der deutschen Verbundsysteme, Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt am Main*

### **Alexander Reinefeld**

**21.–24.05.2002** *CCGrid2002: 2nd IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid, (General Co-Chair zusammen mit Peter Lühr, FU Berlin), BBAW Berlin*

### **Carlos Saro**

**21.10.–23.10.2002** *Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Veranstaltung in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde, Programm und Kurzbericht unter <http://www.museumsbund.de>, ZIB, Berlin*

### **Regine Stein**

**21.10.–23.10.2002** *Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Veranstaltung in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde, Programm und Kurzbericht unter <http://www.museumsbund.de>, ZIB, Berlin*

### **Marc Steinbach**

**04.–05.03.2002** *BMBF-Workshop “Energie- und Finanzwirtschaft”, ZIB, Berlin*

## TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

### 8.1 Gastvorträge

- 27.02.2002** Gunnar W. Klau (TU Wien, Österreich/Stiftung caesar):  
*Ein kombinatorischer Ansatz für orthogonale Plazierungsprobleme*
- 26.04.2002** Eric Stahlberg (Ohio Supercomputer Center (OSC), USA):  
*Cluster-Computing and Bioinformatic Projects at OSC*
- 29.04.2002** Ulrich Lauther (Siemens AG, München):  
*Die C++-Bibliothek TURBO, eine Alternative zu LEDA*
- 29.04.2002** Martin Henk (Technische Universität Wien, Österreich):  
*Representation of polyhedra by polynomials*
- 27.05.2002** Reinhard März (Infineon Technologies AG, München):  
*Photonic Crystals: Application Perspectives in Optical Communication Networks*
- 27.05.2002** Reinhard März (Infineon Technologies AG, München):  
*Anwendungsperspektiven photonischer Kristalle in optischen Kommunikationsnetzen*
- 31.05.2002** Helmut Neunzert (Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Kaiserslautern):  
*Mathematische Herausforderungen der Praxis – Erfahrungen aus den Fraunhofer Institut für Mathematik*
- 14.06.2002** Robi Malik (Siemens AG, München):  
*Ideen zur Verifikation von Hardware mittels Linearer Programmierung*
- 17.06.2002** Ralf Wehrspohn (Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik, Halle):  
*Macroporöses Silizium – ein Modellsystem für 2D und 3D photonische Kristalle*
- 21.06.2002** Seymour Parter (University of Wisconsin-Madison, USA):  
*Semi-Circulant Preconditioning of Elliptic Operators*
- 05.07.2002** Peter Maaß (Universität Bremen):  
*Besseres Wetter durch Wavelets? Mathematische Methoden der Signal- und Bildverarbeitung*

- 11.07.2002** Steffen Staab (AIFB, Universität Karlsruhe):  
*Ontologien und Metadaten für Digitale Bibliotheken*
- 15.07.2002** Jörgen Blomvall (Universität Linköping, Schweden):  
*An emerging powerful modeling language*
- 16.09.2002** Tjark Vredeveld (Università di Roma, La Sapienza, Italien):  
*Performance guarantees of local search for multiprocessor scheduling*
- 17.09.2002** Jesus de Loera (University of California, Davis, USA):  
*Counting lattice points in convex polytopes: combinatorics and algorithms*
- 17.09.2002** Francisco Santos (Universidad de Cantabria Santander, Spanien):  
*The polytope of non-crossing graphs on a planar point set*
- 30.09.2002** Paolo V. Santos (Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Berlin):  
*Acoustic Modulation of Photonic Structures*
- 28.10.2002** Yoshio Tago (Kanazawa University, Japan):  
*Visually Supported Problem Solving Environments*
- 04.11.2002** Carsten Henkel (Quantum Theory, Universität Potsdam):  
*Spontaneous Emission in Photonic Crystals*
- 07.11.2002** Nevzat G. Gençer (Middle East Technical University (METU), Ankara, Türkei):  
*Electro-magnetic source imaging of the human brain*
- 14.11.2002** Hoang Xuan Phu (Vietnam National Center for Sciences and Technology, Hanoi, Vietnam):  
*Some Basic Ideas of the Rough Analysis*
- 22.11.2002** Bob Bixby (ILOG, Houston, USA):  
*Optimization and discrete mathematics: recent progress*
- 02.12.2002** Sebastian Golka (Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik, vormals Heinrich-Hertz-Institut, Berlin):  
*Design und Herstellung photonischer Kristalle in InP*
- 02.12.2002** Markus Behle (Universität Köln):  
*Primale Separierung für Max-Cut und gradbeschränkte minimale Spannbäume*
- 02.12.2002** Klaus Trümper (The University of Texas at Dallas, USA):  
*Learning Logic*

## 8.2 Gastaufenthalte

**Thierry Priol** (INRIA, Frankreich)  
13.03.2002

- Martin Henk** (TU Wien, Österreich)  
29.04.2002
- Reinhard März** (Infineon Technologies AG, München)  
26.-27.05.2002
- Horst Simon** (NERSC, Lawrence Brekeley National Laboratory, Berkeley, USA)  
26.-28.05.2002
- Wolfram Büttner** (Siemens AG, München)  
27.-28.05.2002
- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques, EPFL, Lausanne, Schweiz)  
27.-29.05.2002
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)  
27.-29.05.2002
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)  
27.-30.05.2002
- Simon Karrenberg** (Uni Hamburg)  
02.07.-04.07.2002
- Steffen Staab** (AIFB, Universität Karlsruhe)  
11.07.2002
- Jörgen Blomvall** (Linköpings universitet, Schweden)  
13.-18.07.2002
- Thomas Wolf** (Brock University, St. Catharines, Ontario, Kanada und ZIB-Fellow)  
20.-22.08.2002
- Yoshio Tago** (Kanazawa University, Japan)  
24.-28.10.2002.
- Nevzat G. Gençer** (Middle East Technical University (METU), Ankara, Türkei)  
07-09.11.2002
- Tristan Kremp** (RWTH Aachen)  
11.-15.11.2002
- Herbert Kircher** (IBM Deutschland Entwicklung GmbH, Stuttgart)  
10.12.2002
- Nikos Baltas** (Symban, London, United Kingdom)  
18.-20.12.2002
- Slava Semin** (Symban, London, United Kingdom)  
18.-20.12.2002

### 8.3 Tagungen und Veranstaltungen

- 18.02.2002** Evaluation von Portalsystemen für Bibliotheken, interne KOBV-  
Informationsveranstaltung
- 06.03.2002** Besuch von Bibliothekaren und EDV-Spezialisten der Universität Bratislava in der KOBV-Zentrale im ZIB  
Veranstalter: Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum
- 30.04.2002** KOBV-Workshop "Inhalte des KOBV-Informationsportals – Einstieg in  
gemeinsame Überlegungen"
- 22.-25.05.2002** International Workshop on Visualization and Mathematics 2002, ge-  
meinsam veranstaltet mit FB Mathematik, TU Berlin. H.-C. Hege
- 05.06.2002** Besuch einer Bioinformatik-Delegation aus Cuba  
Veranstalter: Frank Cordes, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Bernd Kallies, Hans-  
Hermann Frese
- 29.07.2002** Besuch der ungarischen Aleph-User-Group in der KOBV-Zentrale im ZIB  
Veranstalter: Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum
- 07.10.2002** Statusseminar des Konsortiums „Planare photonische Kristalle in Materi-  
alsystemen mit hohem Brechzahlkontrast fuer die Telekommunikation“
- 04.11.2002** KOBV-Workshop "KOBV-Informationsportal – Konzepte und Realisie-  
rungsmöglichkeiten"
- 18.11.2002** Präsentation des neuen Produkte DigiTool durch die Firma Ex Libris  
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 27.11.2002** Workshop Lenné 3D: 3D-Landschaftsplanung", gemeinsam veranstaltet  
mit dem Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF),  
Müncheberg. L. Coconu, H.-C. Hege, P. Paar

### 8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 13.03.–20.03.2002** CeBit Hannover, Forschungsmarkt Berlin:  
*FaceLab – Computergestützte Chirurgieplanung (T. Böhm, E. Gladilin, H. La-  
mecker, A. Trepczynski, S. Zachow)*
- 13.03.–20.03.2002** CeBit Hannover, Stand des BMBF:  
*Tele Immersion in Wide Area Networks (A. Merzky, T. Weinkauff)*
- 09.–13.04.2002** 92. Deutscher Bibliothekartag 'Die Bibliothek zwischen Autor und  
Leser' in Augsburg:  
*Demonstration: 2. Version der KOBV-Suchmaschine, Testversion der Neuen  
Oberfläche und Navigation, KOBV-Bibliothekenführer*

(Hildegard Franck, Lavinia Hodoroaba, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Dagmar Otto, Oliver Rudzick, Beate Rusch)

**07.05.–10.05.2002** 119. Kongress der Deutschen Gesellschaft für Chirurgie, ICC Berlin:

*Chirurgieplanung mit Amira – Software Demonstration (H.-C. Hege, D. Stalling, M. Westerhoff, S. Zachow)*

**16.05.2002** Besuch der Bibliotheksschule Frankfurt a.M. in der KOBV-Zentrale im ZIB:

*Demonstration der KOBV-Suchmaschine*  
(Beate Rusch)

**22.05.–25.05.2002** Internationaler Workshop Visualization and Mathematics 2002:

*Forschungsprojekte mit Amira - Software Demonstration (T. Baumeister, H. Lamecker, S. Zachow)*

**23.07.–25.07.2002** ACM Siggraph 2002, San Antonio, TX (USA):

*AmiraVR (M. Westerhoff)*

**19.–22.06.2002** International Supercomputer Conference (ISC2002) Heidelberg:

*Im Rahmen der Ausstellung “The European Supercomputer Summit”; Hubert Busch, Thomas Steinke*

**08.-12.09.2002** 28th European Conference on Optical Communication, Kopenhagen:

*Präsentation des Softwareprogramms JCMmode (Frank Schmidt, Lin Zschiedrich)*

**27.10.–01.11.2002** IEEE Visualization 2002, Boston, MA (USA):

*Amira und AmiraMol (R. Kähler, S. Prohaska, J. Schmidt-Ehrenberg)*

**20.11.2002** Feierliche Eröffnung des DFG-Forschungszentrums für Mathematik, TU Berlin, Audimax:

*3D-Präsentation von Forschungsergebnissen aus dem Bereich Lebenswissenschaften (mit Amira durch die Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)*

## 8.5 Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit

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 2002 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 1.250 Personen im ZIB, von denen ca. 400 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.

**22.01.2002** Visualisierung von Biomolekülen, Besuch einer Schülergruppe vom Canisius-Kolleg Berlin, Veranstalter: Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg

**12.02.2002** Differentialgleichungen in der Praxis, Vortrag mit Softwaredemonstration beim Besuch von Studenten der Technischen Fachhochschule Berlin, Vortrag: Ulrich Nowak

**26.02.2002** Mathematik: Die verborgene Schlüsseltechnologie, Kopernikus-Gymnasium, Blankenfelde, Vortrag: Martin Grötschel

**12.04.2002** Besuch einer Gruppe von Studenten der Freien Universität Berlin im Rahmen eines Seminars, Veranstalter: Peter Deuffhard

**14.05.2002** Dichte Kugelpackungen für gute Codes, TU-Infotage für Schülerinnen und Schüler, TU Berlin, Vortrag: Frank Lutz

**14.05.2002** Besuch von Schülern des Albert-Schweitzer-Gymnasiums, Erfurt, Veranstalter: Hubert Busch, Bernd Kallies, Ralf Götz, Johannes Schmidt-Ehrenberg

**16.05.2002** Besuch von Studenten der Bibliotheksschule Frankfurt a.M. in der KOBV-Zentrale im ZIB, Veranstalter: Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum

**30.05.2002** Mathematik: Die verborgene Schlüsseltechnologie, Hermann-Ehlers-Schule, Berlin, Vortrag: Martin Grötschel

**01.06.2002** Das Lächeln des Mathematikers, öffentlicher Vortrag, 7. Tag der Mathematik, TU Berlin, Vortrag: Peter Deuffhard



- 01.06.2002** Der Wolf, die Ziege und die Kohlköpfe: Quiz, Strategien und offene Probleme in der modernen Mathematik, 7. Tag der Mathematik, TU Berlin, Vortrag: Frank Lutz
- 05.06.2002** High-Performance Computing Facilities at ZIB (Guided Tour), Besuch einer Expertendelegation des kubanischen Wissenschaftsministeriums, Vortrag: Bernd Kallies
- 06.06.2002** Karl der Große, die Verschiffung von Kohlköpfen und mathematische Methoden der Transportoptimierung, Carl-Bechstein-Gymnasium, Erkner, Vortrag: Martin Grötschel
- 15.06.2002** Biomoleküle im Rechner, Lange Nacht der Wissenschaften 2002, ZIB, Vortrag: Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg
- 15.06.2002** 3D-Wissenschaftskino – Reise durch die Dimensionen, Lange Nacht der Wissenschaften, Wissenschaftssommer Berlin 2002, ZIB, Vortrag: Steffen Prohaska, Hartmut Schirmacher, Malte Westerhoff
- 18.06.2002** Besuch einer Studentengruppe des FB Computational Science der TU Chemnitz, Veranstalter: Peter Deuffhard, Detlev Stalling, Steffen Prohaska, Adrian Zymolka, Bernd Kallies, Ralf Götz
- 26./27.06.2002** Vortrag und Führung für das Berliner Kompetenzzentrum für mathematisch-naturwissenschaftlichen Unterricht (MINT) “Dialog: Schule - Hochschule - Unternehmen”, Veranstalter: Frank Cordes, Thomas Steinke
- 01.07.2002** Differentialgleichungen in der Praxis, Vortrag mit Software demonstration beim Besuch von Studenten der Universität Hamburg, Vortrag: Ulrich Nowak
- 01.07.2002** Projektpräsentation im Rahmen des Besuches von Studenten der Universität Hamburg, Vortrag: Stefan Röhl
- 17.09.2002** 3D-Kino – Reise durch die Dimensionen, Leistungskurs Informatik der Walter-Rathenau-Schule, Vortrag: Hans-Christian Hege, Olaf Paetsch
- 24.10.2002** Mathematik, die verborgene Schlüsseltechnologie, Brigittenaue Gymnasium, Wien, Österreich, Vortrag: Martin Grötschel
- 13.11.2002** Differentialgleichungen in der Praxis, Vortrag mit Software demonstration beim Besuch von Schülern des Schiller-Gymnasiums Berlin, Vortrag: Ulrich Nowak
- 25.11.2002** Besuch einer Studentengruppe des FB Mathematik der Universität Magdeburg, Veranstalter: Peter Deuffhard, Ulrich Nowak, Frank Schmidt, Marcus Weber, Martin Seebaß, Evgeny Gladilin, Adrian Zymolka, Bernd Kallies, Ralf Götz
- 29.11.2002** Differentialgleichungen in der Praxis, Vortrag mit Software demonstration beim Besuch von Studenten der Technischen Fachhochschule Wildau, Vortrag: Ulrich Nowak, Marcus Weber

## ORGANISATORISCHES

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984<sup>1</sup> 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 2002 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans-Jürgen Ewers, TUB, Vorsitzender — bis 18.01.2002  
Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, stellvertretender Vorsitzender — (ab 19.01.2002 bis 31.10.2002)  
Prof. Dr. Jörg Steinbach, TUB, stellvertretender Vorsitzender — (ab 01.11.2002)
- Prof. Dr. Gerhard Braun, FUB
- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, stellvertretender Vorsitzender (bis 18.01.2002),  
Vorsitzender (ab 19.01.2002)
- Koordinator für den Bereich Wissenschaft und Forschung Dr. Bernd Köppl, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — (bis 17.01.2002)  
Dr. Peer Pasternack, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur — (ab 05.02.2002)
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft und Betriebe
- Prof. Dr. Horst Czichos, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung — (bis 31.08.2002)  
Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung — (ab 01.09.2002)
- Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

---

<sup>1</sup><http://www.zib.de/org/gesetz/index.de.html>

Der Verwaltungsrat tagte am 30. Januar und 02. Juli 2002.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

## 9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates<sup>2</sup>.

## 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	– Infineon Technologies 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 28. Mai 2002 im ZIB.

<sup>2</sup><http://www.zib.de/org/satzung/index.de.html>

## 9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. CRAY User Group
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.
12. Zuse Park e.V.

## 9.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2002 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*
- Von März 2002 bis September 2002 bis zu der Rufannahme auf eine C4-Professur für Algorithmische und Diskrete Mathematik:  
Prof. Dr. Christoph Helmberg (Universität Kaiserslautern, jetzt Technische Universität Chemnitz)  
*Bündelverfahren für Kombinatorische Optimierungsprobleme*

## 9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzte sich im Jahre 2002 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. Das Land hat ab 2004 ernsthafte, über die bisherigen Kürzungen deutlich hinausgehende Einschnitte angekündigt. Da zudem die Drittmiteinnahmen in bestimmten Teilbereichen wie der Telekommunikation einbrechen, sind die finanziellen Ausblicke wenig erfreulich.

Die SPD/PDS-Koalitionsvereinbarung von Januar 2002 sieht vor, das ZIB in eine Bund-Länder-Finanzierung zu überführen. Dadurch wird vom Land Berlin eine Entlastung des Wissenschaftshaushaltes angestrebt.

Der Zuschuß des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2002 in der "Tradition" der vergangenen Jahre erneut gekürzt worden — für das Jahr 2003 wurde der Ansatz "überrollt" und in gleicher Höhe eingestellt. Für die entscheidungsreifen *investiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnte damit die Beschaffung des HLRN-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 20,5 Millionen Euro durchgeführt werden. Das System hat zum 01.04.2003 den kontingentierten Betrieb aufgenommen.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2002 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 14.490 T€; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 10.164 T€ und auf Investitionen 4.326 T€.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuß von 6.881 T€ (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmiteinnahmen ist – vor Aufstellung des Jahresabschlusses – mit 4.466 T€ anzusetzen. Ein positiver Jahresabschluß 2002 — 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.

	Drittmiteleinnahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte	Sonstige Einnahmen	Einnahmen insgesamt
	Wirtschaft/ Industrie T €	öffentliche Mittel T €	insgesamt T €	konsumtiv T €	investiv T €	investiv T €	T €	T €
1993	366	410	776	4.140	931	175	72	6.094
1994	910	875	1.785	4.245	4.472	3.834	78	14.414
1995	1.310	600	1.910	4.681	2.322	1.683	51	10.647
1996	1.168	755	1.923	4.863	511	0	51	7.348
1997	1.279	1.330	2.609	7.758 <sup>1</sup>	409	0	121	10.897
1998	859	1.926	2.785	7.585	434	0	51	10.855
1999	1.078	1.743	2.821	7.592 <sup>2</sup>	1.324	889	98	12.724
2000	1.479	1.912	3.391	7.222	537	0	154	11.304
2001	1.293	2.044	3.337	7.018	802	240	199	11.596
2002 <sup>3</sup>	1.271	3.195	4.466	6.881	1.411	1.531	217	14.506

Tabelle 9.1: Einnahmen in den Jahren 1993 — 2002 (in EURO)  
— ohne BRAIN- und KOBV-Serviceanteil —

<sup>1</sup>Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

<sup>2</sup>Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

<sup>3</sup>voraussichtliches Ist 2002 – vor Aufstellung des Jahresabschlusses

Die Entwicklung der Drittmiteinnahmen — Angaben in EURO — lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

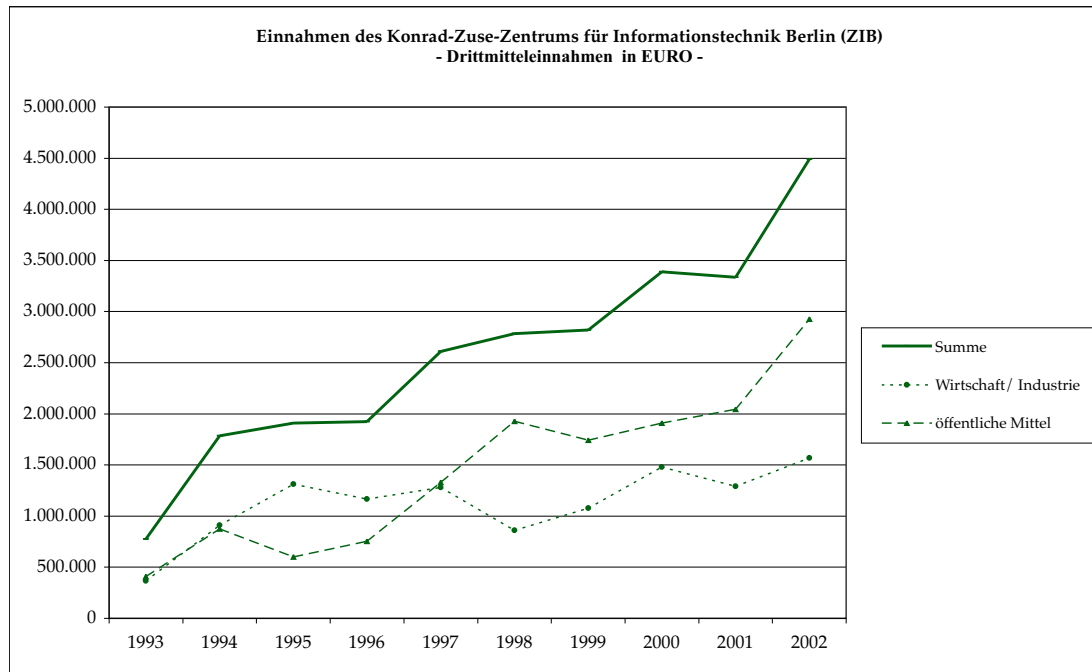


ABBILDUNG 9.1: Drittmiteinnahmen in EURO

## 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. 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:

	<b>01.01.2002</b>	<b>01.01.2003</b>
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	75	84
Datenverarbeitung/Technik	24	33
Verwaltung/Bibliothek	20	21
KOBV-Zentrale	11	13
Studentische Hilfskräfte	39	42
<b>Insgesamt</b>	<b>173</b>	<b>197</b>

ABBILDUNG 9.2: Zahl der Beschäftigten

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2003 insgesamt 101 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 94 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/ 841 85–101 Dr. Martin Weiser 841 85–170
Wissenschaftliche Software:	Dr. Ulrich Nowak 841 85–175
Wissenschaftliche Visualisierung:	Hans–Christian Hege 841 85–141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ 841 85–210 Dr. Jörg Rambau 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](mailto:nachname@zib.de)