

Jahresbericht 2004

Revidierte Fassung

Vorwort

Wie in den Vorjahren legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz *Zuse-Institut Berlin*, noch kürzer *ZIB*, auch nach Ablauf des Jahres 2004 all seinen Freunden und aufmerksamen Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Jahresbericht vor.

Auch im vergangenen Jahr waren wir wieder erfolgreich tätig in Projekten aus *Anwendungsgebieten* wie etwa computergestützte Therapie- und Operationsplanung, Design von nanophotonischen Bauteilen, Telekommunikation und Verkehrsplanung sowie in methodischen Schwerpunkten wie adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden, Laplace-Domain-Methoden, virtuelle Labore, diskrete Strukturen, ganzzahlige Optimierung und Grid Computing. Ein geraffter Überblick über unsere Forschungsaktivitäten findet sich in Kapitel 2.1, genauere Details schließen sich daran in Kapitel 2.2 an.

Erwartungsgemäß konnten wir die auf Sondertatbeständen beruhenden hohen *Drittmittelnahmen* der beiden Vorjahre nicht mehr erreichen. Damit hat sich die Aussage des Vorjahres bestätigt, dass eine Stabilisierung dieses Niveaus aufgrund der schwierigen finanziellen Rahmenbedingungen im industriellen und öffentlichen Bereich kaum zu erreichen sein wird. Es gilt jedoch nach wie vor, dass etwa zwei Drittel unserer Wissenschaftlerstellen aus Drittmitteln finanziert werden. Immerhin wurde im Berichtsjahr das drittbeste Ergebnis in der Geschichte des ZIB erzielt.

Wie in den Vorjahren waren wir besonders als *Synergiekatalysator* für die Universitäten FU, HU und TU sowie für eine Reihe von außeruniversitären Forschungseinrichtungen aktiv: Beispiele sind das DFG-Forschungszentrum MATHEON, das Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (*BCB*), der Kooperative Biobibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (*KOBV*) sowie das landesweite Netz BRAIN. Darüber hinaus spielt das ZIB inzwischen in zahllosen Verbundprojekten berlinweit und bundesweit eine weithin sichtbare Rolle. Auch in die derzeit allerorten betriebene Vorbereitung auf eine irgendwann doch noch zu erwartende Ausschreibung von "Exzellenzclustern" ist das ZIB personell wie inhaltlich auf das Engste eingebunden.

Erfreulicherweise konnte die Beschaffung des *HLRN-Rechners* als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit der Installation eines noch leistungsfähigeren Netzwerks und anschließender erfolgreicher Abnahme abgeschlossen werden. Der Rechner wurde das ganze Jahr lang rund um die Uhr von den Wissenschaftlern als zuverlässiges Arbeitspferd intensiv genutzt. Trotz der Leistungssteigerung konnte der Rechenzeithunger unserer Power-User nicht gestillt werden. Um dem absehbaren Engpass begegnen zu können, haben wir – wiederum im bewährten HLRN-Verbund – die Weichen zur Beschaffung eines ca. zehnmal leistungsfähigeren Nachfolgesystems gestellt. Die Chancen für eine Beschaffung in den Jahren 2006/07 stehen nicht schlecht: Unser Antrag wurde im Wissenschaftsrat positiv aufgenommen und die sechs Bundesländer stehen zu ihren vertraglichen Verpflichtungen zur Sicherung der norddeutschen Wissenschaftslandschaft.

Der *Wissenschaftliche Beirat* des ZIB tagte am 29./30. Juni 2004. Wie in den Vorjahren sei auch diesmal (und wie immer ohne Erröten) aus diesem Bericht zitiert: "... Das ZIB stellt sich großen Aufgaben und löst sie! ... Der Wissenschaftliche Beirat gratuliert dem ZIB zu seinen Erfolgen auf absolutem Weltniveau und der Weltstadt Berlin zu seinem weltmeisterlichen ZIB." Sollte die werten Kollegen Gutachter beim letzten Teilsatz gar der Schalk geritten haben?

Berlin, im Mai 2005

A handwritten signature in black ink that reads "Peter Deuffhard". The script is cursive and somewhat stylized, with the first letters of the first and last names being capitalized and prominent.

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



Das Konrad-Zuse-Zentrum in Berlin-Dahlem

Weitere Informationen über das ZIB sowie sämtliche Publikationen sind unter

<http://www.zib.de>

zu erhalten.

Inhaltsverzeichnis

1	Das ZIB — Struktur und Ziele	9
2	Forschung und Entwicklung	15
2.1	Überblick	15
2.2	Schwerpunkte	24
2.2.1	Molekulare Konformationsdynamik	24
2.2.2	Nano-Optik	31
2.2.3	Medizinische Therapie- und Operationsplanung	39
2.2.4	Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse	52
2.2.5	Virtuelle Labore	59
2.2.6	Geometrische Formanalyse	71
2.2.7	Nichtlineare Optimierung und Steuerung	77
2.2.8	Diskrete Strukturen	81
2.2.9	Telekommunikation	91
2.2.10	Ganzzahlige Optimierung	105
2.2.11	Online-Optimierung	111
2.2.12	Verkehr	121
2.2.13	Verteilte Systeme und Anwendungen	130
2.3	Auszeichnungen und Rufe	142
3	Wissenschaftliche Dienstleistungen	143
3.1	Überblick	143
3.2	Schwerpunkte	146
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)	146
3.2.2	Suchmaschinentechnologien und Math-Net	150
3.2.3	Math&Industry – Anwendungen der Mathematik im Web	151
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen	153
3.2.5	Computeralgebra (REDUCE)	155
4	Supercomputing und Netze	159
4.1	Hochleistungsrechner am ZIB	159
4.1.1	Hochleistungsrechner Nord (HLRN)	159

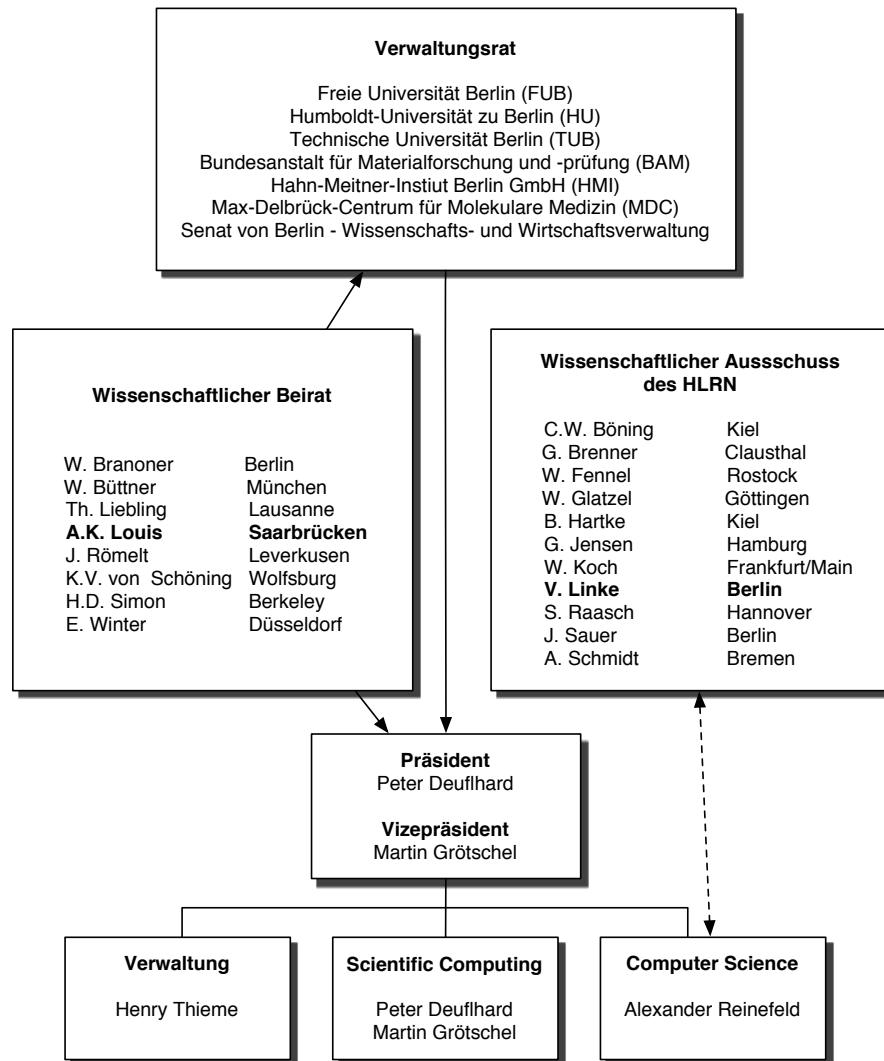
4.1.2	Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte	164
4.2	Fachberatung	172
4.2.1	Chemie und Bioinformatik	173
4.2.2	Geowissenschaften	174
4.2.3	Ingenieurwissenschaften	174
4.2.4	Physik	175
4.3	Weitverkehrsnetze	176
4.3.1	Virtueller Supercomputer Berlin-Hannover	176
4.3.2	Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN	178
5	Publikationen	183
5.1	Preprints	183
5.2	Mitherausgabe von Publikationen	183
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden	184
5.4	Monographien	191
5.5	Dissertationen	192
5.6	Examensarbeiten	192
6	Software	195
6.1	Numerische Algorithmen	195
6.2	Visualisierung	196
6.3	Optimierung	197
6.4	Computeralgebra	201
6.5	Computer Science	202
6.6	Informationsdienste	205
6.7	KOBV-Dienste	206
7	Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern	211
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte	211
7.2	Vorlesungen und Seminare	234
7.3	Mitveranstalter auswärtiger Tagungen	238
8	Tagungen und Gäste am ZIB	241
8.1	Gastvorträge	241
8.2	Gastaufenthalte	242
8.3	Tagungen und Veranstaltungen	245
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen	246
8.5	Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit	247

9 Organisatorisches	251
9.1 Organe	251
9.2 Satzung	251
9.3 Wissenschaftlicher Beirat	252
9.4 Mitgliedschaften	252
9.5 ZIB-Fellows	253
9.6 Selbstverwaltung	253
9.7 Wirtschaftliche Situation	253
9.8 Personelle Entwicklung	256
10 Ansprechpartner	259
Anhang: Übersicht Preprints	261

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 und in Praktischer Informatik. Zugleich bietet es Hochleistungsrechnerkapazität 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 rechen-technische Erprobung der Algorithmen an leistungsfähigen parallelen Computersystemen und der Test der mathematischen Modelle auf ihre praktische Brauchbarkeit sollen dabei eine Synthese eingehen.

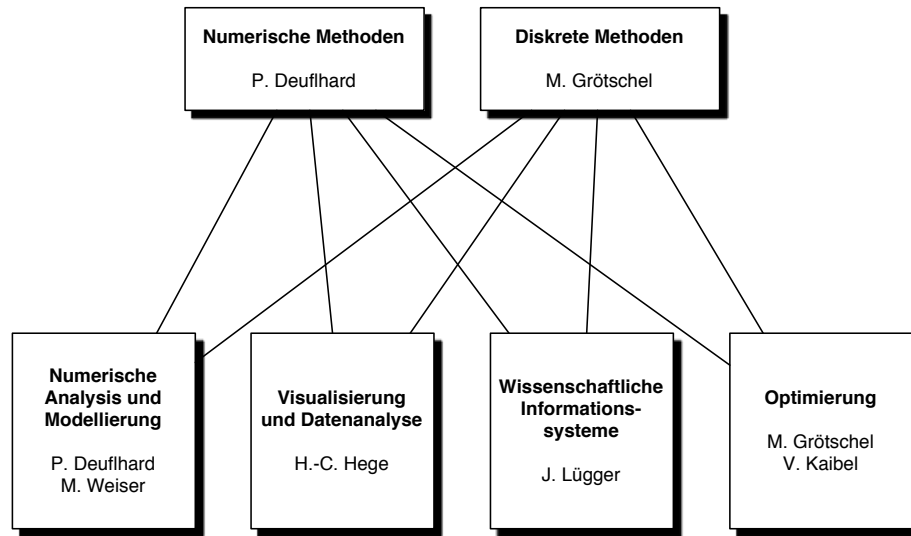
Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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 Hochleistungsrechnern 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 Personenverkehr, Transport und Logistik, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energie-Versorgung, Nano-Optik. Das ZIB ist zudem – neben den Berliner Universitäten FU, HU und TU sowie dem WIAS – eine der fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum MATHEON “Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse” tragen.

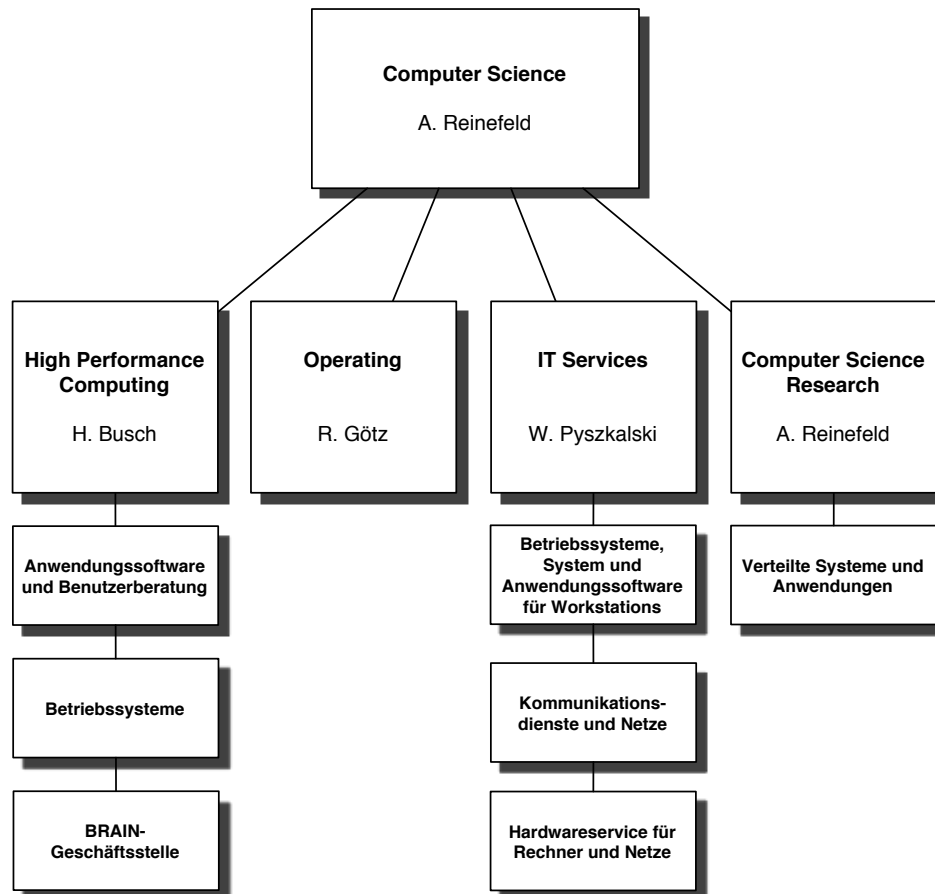
Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt in Berlin im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen – HLRN – als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen in Norddeutschland ein Hochleistungsrechnersystem der Firma IBM mit 512 Prozessoren. Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus den anderen Bundesländern zur Verfügung. Über die Zuteilung von Rechenzeit an Großprojekte entscheidet ein Zulassungsausschuss. In allen vom Zulassungsausschuss befürworteten Projekten arbeitet mindestens ein Fachberater des HLRN 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. Dabei sind Fragen der mathematischen Modellierung häufig zwingend mit einzubeziehen. Die Abteilung gliedert sich zum 01.07.2004 im Zusammenhang mit der Auflösung der Abteilung *Wissenschaftliche Software* und der weitgehenden Integration der betreffenden Mitarbeiter in die folgenden Arbeitsgruppen: Computational Medicine, Computational Nano-Optics und Computational Drug-Design. Derzeit behandelte Hauptanwendungsgebiete sind Biotechnologie, Nano-Optik und Medizintechnik.

Abteilung Visualisierung und Datenanalyse. Aufgabe ist die Entwicklung und Implementierung von neuen Verfahren in den Bereichen wissenschaftliche Visualisierung und biomedizinische Bildverarbeitung. Die Abteilung gliedert sich in die Arbeitsgruppen Data Analysis and Visualization in Science, Geometry and Visualization und Medical Planning Systems. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind medizinische Therapieplanung, computergestützte Chirurgie, Merkmalsextraktion bei komplexen Strömungen und Biotechnologie. Die Abteilung stellt Visualisierungs-Software und -Hardware zur Verfügung und unterstützt 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. Konkrete Anwendungsprojekte gibt es derzeit in den Bereichen Telekommunikation, Öffentlicher Personennahverkehr, Produktion, Energieversorgung, Fahrzeugbau sowie Transport und Logistik.

Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme. Aufgaben sind die Konzeption, die Entwicklung und die Realisierung mathematischer Informationssysteme für mathematische Software. Beispielfhaft für Internet-basierte Informationstechnologie sind die Projekte “Informationendienste 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 Computer Science Research. Der Schwerpunkt der Forschung liegt in der Entwicklung und Implementierung von Systemsoftware für parallele und verteilte Systeme. Insbesondere werden zuverlässige, skalierbare Methoden für das Management verteilter Dienste und Daten entwickelt. Die Methoden werden anhand komplexer Anwendungen, insbesondere aus dem Bereich der Bioinformatik validiert.

Abteilung High Performance Computing. Zu den Hauptaufgaben zählt die Auswahl, Bereitstellung und Wartung von Hochleistungsrechnerkapazität 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. Die Abteilung koordiniert auch das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN, betreibt das Sekretariat des HLRN und betreut den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN.

Abteilung Operating. 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 IT Services. 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.

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 umfasste bisher die Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung*, *Wissenschaftliche Visualisierung* und *Wissenschaftliche Software*. Im Berichtszeitraum wurde eine organisatorische Straffung zugleich mit einer inhaltlichen Untergliederung vorgenommen. Die Abteilung *Wissenschaftliche Software* wurde aufgelöst, die betroffenen Mitarbeiter wurden andere Abteilungen integriert. Es verbleiben die beiden Abteilungen

- *Numerical Analysis and Modelling*, untergliedert in die Arbeitsgruppen

<i>Computational Medicine</i>	(Leitung Dr. Martin Weiser),
<i>Computational Nano-Optics</i>	(Leitung PD Dr. Frank Schmidt)
	und
<i>Computational Drug Design</i>	(Leitung Dr. Frank Cordes) sowie

- *Visualization and Data Analysis*, untergliedert in die Arbeitsgruppen

<i>Visualization in Science</i>	(Leitung Hon. Prof. Hans-Christian Hege),
<i>Geometry and Visualization</i>	(Leitung PD Dr. Konrad Polthier)
	und
<i>Medical Planning Systems</i>	(Leitung Dr. Stefan Zachow).

Nach wie vor steht die mathematische Modellierung und numerische Simulation von natur- und ingenieurwissenschaftlichen Problemen im Vordergrund.

Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

- Konformationsanalyse
- Laplace-Domain-Methode
- Innere-Punkte-Methode im Funktionenraum
- adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden
- Virtuelle Labore

bearbeitet. Aus Sicht der *Anwendungsdisziplinen* lagen die Schwerpunkte der interdisziplinären Arbeit in den Feldern

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Medizin: Therapie- und Operationsplanung
- Nanotechnologie: Nano-Optik
- 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, mit der auch ein gemeinsames Campus-Forschungsseminar abgehalten wird. Darüber hinaus bilden Mitglieder der ZIB-Arbeitsgruppe auch Bachelor- und Master-Studierende des *Studienganges Bioinformatik* an der FU aus.

Zentrales Thema dieses Schwerpunktes ist der Entwurf von Medikamenten auf der mathematischen Basis der *Konformationsanalyse*. Die in den Vorjahren am ZIB entwickelte Robuste Perron-Cluster-Analyse (PCCA) hat sich inzwischen auch in anderen Bereichen etablieren können, etwa in der Analyse von Genexpressionsdaten. Die PCCA bildet auch die Basis für neue adaptive “gitterfreie” Methoden, bei denen das Mengenkonzept durch ein Funktionskonzept ersetzt wird, im Sinne eine Galerkin-Approximation. Dieser Ansatz bietet mehrere Vorteile: so werden etwa Übergangszustände klar identifiziert und ein “trapping” in einzelnen metastabilen Mengen verhindert. Außerdem wurden weitere Zwischenschritte auf dem Weg zu einem vollflexiblen Docking (d.h. flexibler Ligand *und* flexibles Target) getan, das unser eigentliches Ziel ist. Intensive Dockingstudien wurden zum Aufbau empirischer Scoringfunktionen durchgeführt. Zugleich haben die neuen Simulationsmethoden auch in der Visualisierung zu neuen Fragestellungen (virtuelles Moleküllabor) geführt. So wurde eine graphentheoretische Methode aus der Arbeitsgruppe Prömel (HU Berlin) modifiziert und mit Gewinn auf die Untersuchung “ähnlicher” Duftmoleküle aus der Neurobiologie angewendet.

Ein Teil dieser Arbeiten wurde im Verbundprojekt *Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik* (BCB) durch eine Nachwuchsgruppe (F. Cordes) vom BMBF gefördert. Das Thema Moleküldynamik geht auch ein in Projekt A4 des DFG-Forschungszentrums MATHEON “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*”. Im Berichtszeitraum hat sich zudem eine neue Industriekooperation mit der Firma Mercury ergeben.

Nano-Optik. Dieser Schwerpunkt, bisher unter dem Rubrum “Integrierte Optik”, war auch im Berichtszeitraum wiederum äußerst erfolgreich. Die Ansätze der letzten Jahre zur Lösung in-

dustrierelevanter Probleme wurden konsequent weiterverfolgt. Auf der Basis unserer *Laplace-Domain-Methode* wurde eine Modifikation der PML-Methode (**P**erfectly **M**atched **L**ayer) hergeleitet, die sich in nanophotonischen Anwendungsproblemen hervorragend bewährt. Als Beispiele seien genannt: Entwurf von 3D-photonischen Kristallen, Entwicklung eines neuartigen Mikroskops sowie neue optische Materialien mit negativem Brechungsindex.

Sämtliche Forschungsaktivitäten, bis auf die Stelle des Arbeitsgruppenleiters F. Schmidt, wurden durch Drittmittel finanziert. So waren wir im BMBF-Verbundprojekt *HiPhoCs* mit zwei Projekten zu photonischen Kristallen aktiv, bei denen das Design neuartiger industrie-relevanter optischer Komponenten im Vordergrund stand (beendet 3/05). Im Projekt D9 des DFG-Forschungszentrum MATHEON "*Mathematik für Schlüsseltechnologien*" entwickelten wir neue algorithmische Konzepte, um effektivere Löser insbesondere für optische Wellen in periodischen Medien bereitzustellen. Im Berichtszeitraum neu hinzugekommen sind: ein gemeinsames DFG-Projekt mit T. Hohage (Universität Göttingen), ein Projekt im DFG-Schwerpunktsprogramm "Photonische Kristalle" sowie eine Stelle aus Industriemitteln (Infineon). Es verdient Erwähnung, dass wir an zwei weiteren großen BMBF-Verbundprojekten aktiv teilgenommen haben, die sehr positiv begutachtet worden waren, dann aber vom BMBF aus Geldmangel doch nicht gefördert wurden. Es fällt schwer, dies nicht im Zusammenhang mit den im Schwange befindlichen Exzellenz-Programmen des BMBF zu sehen.

Wie in den Vorjahren fand wieder eine Vorlesung "Computational Photonics" an der TU und FU statt; darüber hinaus wurden vier Diplomarbeiten und eine Dissertation betreut. Die guten Kontakte mit der Spin-off-Firma *JCMwave* wurden auch 2004 weitergepflegt.

Medizinische Therapie- und Operationsplanung. Im Berichtszeitraum wurde die Klinische DFG-Forschergruppe *Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese* (Charité, Berlin) begutachtet mit Bewertung "Exzellente" für den Verbund als Ganzen und insbesondere "Schlüsselprojekt" für unser Teilprojekt (TP 7). Seit der Begutachtung kam noch ein weiteres Teilprojekt (TP 12) dazu. Darüber hinaus erhielt die Forschergruppe eine ausdrückliche "SFB-Empfehlung". Diese Projekte sind dual konstruiert zu dem Projekt A2 des DFG-Forschungszentrums MATHEON, in dem in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Kornhuber (FU Berlin) und Krause (Universität Bonn) die zugehörige mathematische Theorie und Algorithmik vorangetrieben wird.

Im Projekt A1 des DFG-Forschungszentrums MATHEON wurde die Arbeit in Richtung auf ein Mehrskalmodell fortgesetzt auf der Basis des mikrovaskulären Modells der Thermoregulation, das wir im Vorjahr hergeleitet hatten. Ebenfalls in diesen Zusammenhang gehört die mathematische Behandlung inverser Probleme, speziell die Identifizierung von Temperatur und Perfusion aus MR-Daten; ein dazu beantragtes Einzelprojekt gemeinsam mit unserem klinischen Partner P. Wust (Charité, Campus Virchow) wurde im Januar 2004 bewilligt, wobei die Stelle direkt in der Klinik angesiedelt ist. Zur Thermoregulation haben sich darüber hinaus einige weitere sehr interessante Anwendungskontakte ergeben.

Als Fortsetzung der Aktivitäten der vorigen Jahre wurde unser 3D-System zur Planung von knochen- und weichgewebeverlagernden Eingriffen in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie (MKG) weiterentwickelt. Wir kooperieren weiterhin mit klinischen Partnern in Basel, München, Leipzig, Erlangen und Stockholm. Die Anzahl und Komplexität der Planungen nimmt mit Erweiterung unserer Projektpalette kontinuierlich zu. Eine Überprüfung der Genauigkeit der 3D-Weichgewebeprognose nach simulierter Knochenumstellung lieferte aus chirurgischer Sicht bereits ein zufriedenstellendes Ergebnis. Die Möglichkeit der quantitativen

Analyse der Simulationsgüte ermöglicht uns, die mathematische Modellierung des Weichgewebes zu verbessern und die Randbedingungen korrekt zu behandeln. Hier eröffnet sich ein vielversprechendes Forschungsgebiet, in dem das ZIB eine weltweit führende Rolle einnehmen kann. Neben der MKG-Chirurgie wurden auch andere Fragestellungen der computergestützten Operationsplanung behandelt, u.a. die Planung von chirurgischen Schädelumformungen bei Kleinstkindern mit verknöcherten Schädelnähten (Neurochirurgie), von rhinochirurgischen Eingriffen (HNO-Chirurgie) und von knochenverankerten Zahnimplantaten unter Berücksichtigung des mandibulären Nerves. Hierbei werden Synergieeffekte zum Projekt F2 im DFG-Forschungszentrum MATHEON genutzt.

Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse. Zur Analyse sehr umfangreicher Bilddaten, die nicht mehr in den Hauptspeicher eines Arbeitsplatzrechners passen, wurden neue Verfahren entwickelt. Der praktische Umstand erfordert tiefgehende Maßnahmen auf Seiten der Datenstrukturen und der Algorithmen. Anwendungen dieser Verfahren sind unter anderem die interaktive Analyse von Knochenfeinstrukturen und die Rekonstruktion von 3D-Geometrien aus hochaufgelösten mikroskopischen Schnittbildern. Die Arbeiten zur Analyse von zerebralen Aneurysmen wurden fortgesetzt und führten zur Beantragung einer DFG-Forschergruppe. In den neuen Arbeitsfeldern "Registrierung von 3D-Bilddaten" und "Visuelle Analyse von Tensorbildern" konnten bereits interessante, publizierbare Resultate erzielt werden.

Virtuelle Labore. Neben den schon weiter oben erwähnten virtuellen Laboren in der Therapie- und Operationsplanung sowie in der Moleküldynamik werden am ZIB seit Jahren weitere dieser integrierten Software-Umgebungen entwickelt. Das virtuelle *Strömungslabor* erhielt durch die Aufnahme in den SFB 557 "Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen" eine anwendungsorientiertere Ausrichtung. Neben den quantitativen Eigenschaften von Strömungen sollen auch die strukturellen erfasst und dargestellt werden, um ein besseres Verständnis des Einflusses von physikalischen Parametern zu erlangen. Für ein Projekt aus dem Bereich des Schiffbaus (VIRTUE, VIRTual Tank Utility in Europe) gab es eine positive Vorentscheidung. Die Ziele hier werden zwar ebenfalls stark durch die Anwendungen vorgegeben, doch sollen auch methodische Entwicklungen vorangetrieben werden, insbesondere zur Darstellung von zeitabhängigen Strömungen.

Bei der Weiterentwicklung des virtuellen *Astrophysik-Labors* lag der Schwerpunkt auf Verfahren zur Darstellung von skalaren, vektoriellen und tensoriellen zeitabhängigen Feldern, zum Teil auf hierarchischen, lokal verfeinerten (AMR-)Gittern mit veränderlicher Gittertopologie.

Im virtuellen *Neurolabor* wurden die Methoden zur Registrierung individueller Datensätze in Gehirnatlanten hinsichtlich Genauigkeit, Laufzeit und Robustheit weiterentwickelt und zur Beantwortung neuroanatomischer und neurofunktioneller Fragen eingesetzt. Unter anderem wurden realitätsnahe numerische Simulationen zur Signalausbreitung in Einzelneuronen verschiedener Insekten durchgeführt.

Im Bereich der *Landschaftsvisualisierung* konnten große Fortschritte hinsichtlich der praktischen Nutzbarkeit erzielt werden. In Zusammenarbeit mit der Stiftung "Preußische Schlösser und Gärten" präsentierte das Forschungsprojekt Lenné3D als einen Höhepunkt der Ausstellung "Preußisch Grün" die Möglichkeit eines interaktiven Spaziergangs durch das ehemalige "Italienische Kulturstück" von Peter Joseph Lenné. Zum Einsatz in der 180-Grad-Panoramaprojektion kamen am ZIB entwickelte Soft- und Hardware: der Lenné3D-Player und ein sogenanntes "tangible Interface", das den Besuchern eine leichte Steuerung erlaubte.

Geometrische Formanalyse. Die Arbeitsgruppe “Geometry and Visualization” wurde Anfang 2004 unter der Leitung von K. Polthier neu gegründet. Schwerpunkte sind geometrische Variationsprobleme zur Berechnung und Modellierung von hochqualitativen Flächen im Computer Aided Design (CAD) und der Bereich Geometry Processing in der Computergrafik.

Schon in kurzer Zeit hat die Arbeitsgruppe qualifizierte Kontakte in die Industrie aufgebaut. Für *mental images GmbH* Berlin, den weltweit führenden Hersteller von Renderingsoftware für Animationsfilme, wurde unser neuer Algorithmus *FreeLence* zur effizienten Kompression digitaler Geometrien entwickelt und implementiert, eine Verbesserung bei Kompressionsverfahren für Gitterkombinatorik um mehr als einen Faktor 20. Mit der *Tebis AG*, München wurde eine langfristige Kooperation zur Modellierung von Class-A Flächen eingegangen. Mit der *DaimlerChrysler AG* wurden gemeinsame Patentanträge zur globalen Illumination eingereicht, die eine schnelle realistische Darstellung von Oberflächen unter natürlichem Licht ermöglichen. Die theoretischen Grundlagen wurden im DFG-Forschungszentrum MATHEON in den Projekten F1 und F4 gelegt.

Als gemeinsame Veranstaltung an TU und FU wurde die Vorlesung “Einführung in Scientific Visualization” gelesen. Darüber hinaus wurden vier Diplomarbeiten (zwei abgeschlossen) und drei Dissertationen betreut.

Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung. Die seit einiger Zeit am ZIB betriebenen neuartigen adaptiven Multilevel-Methoden zur Behandlung von Problemen der optimalen Steuerung wurden in Richtung auf partielle Differentialgleichungen vorangetrieben; im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON “*Mathematik für Schlüsseltechnologien*” (Projekt A1) wurde die Kooperation mit F. Tröltzsch (TU, Mathematik) durch regelmäßige interne Seminare und eine erste gemeinsame Arbeit weiter gepflegt. Eine erste Verbindung zur optimalen Steuerung bei der Krebstherapie “Regionale Hyperthermie” wurde implementiert. Dieser Schwerpunkt bildet eine Brücke zum Bereich “Diskrete Methoden” des ZIB.

Der Bereich **Diskrete Methoden** besteht aus den Abteilungen *Optimierung* (auf die wir uns hier konzentrieren) und *Wissenschaftliche Informationssysteme* (die in Kapitel 3 beschrieben wird) mit folgenden Schwerpunkten:

Optimierung

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

Wissenschaftliche Informationssysteme

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Informationsdienste für die Mathematik (Math-Net)
- Math&Industry

- Informationstechnische Werkzeuge für Museen
- Computeralgebra (REDUCE)

Der abteilungsübergreifende Schwerpunkt *Nichtlineare Optimierung und Steuerung* ist dabei Ausgangspunkt der Ausnutzung von Synergien verschiedener Bereiche im Haus.

Das Konzept der Abteilung *Optimierung* beruht auf einer Verzahnung von mathematischer Modellierung konkreter industrieller Anwendungsprobleme, Entwurf von Algorithmen, Transfer in die Praxis und theoretischer Grundlagenforschung. Der Erfolg der Arbeit beruht dabei wesentlich auf der Verflechtung von Theorie und Praxis. Einerseits ist vielfach die Lösung komplexer Anwendungsprobleme ohne spezifische Weiterentwicklung der mathematischen Theorie gar nicht möglich, andererseits gewinnt die Grundlagenforschung (hier in erster Linie in der diskreten Mathematik) häufig durch geeignete Abstraktion spannende und richtungsweisende Fragestellungen aus konkreten Praxisproblemen.

Dass diese Konzeption in verschiedene Richtungen tragfähig ist, wird durch die Einbindung der Abteilung in unterschiedlich ausgerichtete Forschungsförderungen wie die DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*, die beiden DFG-Graduiertenkollegs *Combinatorics, Geometry, Computation* und *Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften*, mehrere BMBF- und EU-Programme sowie natürlich das DFG-Forschungszentrum MATHEON dokumentiert. Die Entwicklungsmöglichkeiten für den wissenschaftlichen Nachwuchs sind in diesem Umfeld ausgezeichnet, wie nicht zuletzt im Jahr 2004 die Berufungen von Jörg Rambau (C4-Professur Bayreuth) und Tjark Vredeveld (Assistenzprofessur Maastricht, Niederlande) sowie die Vergabe des Diplomarbeitspreises der Gesellschaft für Operations Research (GOR) an Andreas Tuchscherer gezeigt haben.

Im Folgenden geben wir einen kurzen Überblick über die Arbeit in den Schwerpunkten der Abteilung *Optimierung*. Eine ausführlichere Darstellung findet sich in Abschnitt 2.2.

Nichtlineare Optimierung und Steuerung Dies ist ein gemeinsamer Schwerpunkt der beiden Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung* und *Optimierung*, der sich mit Problemen befasst, bei denen eine Modellierung mit partiellen Differentialgleichungen sinnvoll ist oder über stochastische Aspekte Nichtlinearität ins Spiel kommt. Das vom BMBF geförderte Projekt zur Lastverteilung in Gasnetzen (mit der Ruhrgas AG) wurde im Jahr 2004 erfolgreich abgeschlossen. Hier wurden in der letzten Projektphase durch Ausnutzung der Netztopologie erhebliche Reduktionen der Rechenzeiten erreicht. Unser in das Betriebssystem der Berliner Wasserbetriebe eingebundenes Optimierungsmodul haben wir im vergangenen Jahr z.B. durch Verbesserung der Heuristiken zur Vermeidung von Pumpenwechseln weiterentwickelt.

Diskrete Strukturen Ohne auf den Fundus struktureller Erkenntnisse der diskreten Mathematik zurückzugreifen und ohne diesen Fundus immer mehr zu erweitern, wären die großen Erfolge der kombinatorischen Optimierung bei der Lösung von Problemen in Anwendungsfeldern wie z.B. Telekommunikation oder Verkehr nicht möglich. Unsere Anwendungsprojekte begleitend, arbeiten wir deswegen kontinuierlich an verschiedenen wichtigen Problemen der Grundlagenforschung im Bereich der diskreten Mathematik. Hauptthemen waren dabei im vergangenen Jahr Verallgemeinerungen von perfekten Graphen, die Bestimmung der Baumweite von Graphen sowie polyedrische Unterteilungen. Die Untersuchung von speziellen Gra-

phenklassen ist wichtig, weil in Anwendungen relevante Graphen oft spezielle Strukturen aufweisen, die man dann im Entwurf von praxistauglichen Algorithmen ausnutzen kann und muss. Polyedrische Unterteilungen (oder spezieller: Simplizialkomplexe) sind nicht nur für sich interessante und in Bereichen wie der numerischen Mathematik oder der Computergrafik grundlegende Konzepte, sondern in der Topologie spezieller, mit einem Graphen assoziierter Komplexe kann auch wertvolle Information über so wichtige Invarianten des Graphen wie seine Färbungszahl erkennbar werden. Wie in den vorausgehenden Jahren haben wir auch im vergangenen Jahr besonderes Gewicht auf die Vermittlung diskreter Mathematik in Schul- und Buchprojekten gelegt. Hauptaktivitäten waren hier die Buchprojekte *Combinatorial Optimization at Work* im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON und *Mathematik erleben – Kombinatorische Optimierung lehren und lernen*.

Telekommunikation Telekommunikation ist ohne Zweifel ein Kernaspekt unserer Informationsgesellschaft. Der entsprechende Markt entwickelt sich rasant, neue Dienste und Anwendungen stellen immer höhere Kapazitätsanforderungen (z.B. die stark wachsende Zahl privater DSL-Anschlüsse), die nur durch sehr effiziente Nutzung vorhandener und bestmöglich geplante Installation neuer Ressourcen befriedigt werden können. Hier sind mathematische Optimierungsverfahren, insbesondere aus dem Bereich der diskreten Mathematik, von enormer Bedeutung. Seit Jahren arbeiten wir deswegen auf diesem Gebiet mit verschiedenen industriellen Partnern sehr erfolgreich zusammen. In einem vom DFG-Forschungszentrum MATHEON geförderten Projekt entwickeln wir (in Kooperation mit E-Plus und T-Systems Nova) über mehrere Technologie- und Hierarchieebenen integrierte Planungsverfahren für den Auf- und Ausbau von Netzen. Ein hier von uns neu entwickeltes mathematisches Modell nutzen wir auch in einem gemeinsamen Projekt mit dem DFN-Verein zur Optimierung des 2006 in Betrieb gehenden neuen Wissenschaftsnetzes X-WiN. Wie schon in den vergangenen Jahren haben wir den DFN-Verein intensiv beim Ausbau und bei der Betriebsoptimierung des aktuellen Netzes G-WiN unterstützt. In einem BMBF-Netzwerkprojekt bringen wir jetzt unsere Kompetenzen im Bereich der Netzplanung auch zur Entwicklung von Kommunikationsstrukturen für dezentrale Energienetze ein. In Zusammenarbeit mit der Fakultät Elektrotechnik und Informatik der TU Berlin wurden die Grundlagen für ein neues, die Anforderungen von Echtzeitanwendungen berücksichtigendes Transportprotokoll im Internet geschaffen. Im Mobilfunkbereich entwickeln wir im Rahmen eines weiteren MATHEON-Projekts Verfahren zur Planung von UMTS-Netzen. Hier haben wir ein neues Verfahren zur Analyse von Funknetzen entwickelt, das auf der Basis von Kopplungsmatrizen eine sehr schnelle Bewertung einer Netzkonfiguration erlaubt. Dies ermöglicht uns nun, die Funknetzplanung mit bisher nicht praktikablen Optimierungsmethoden durchzuführen. Ferner wurde die WWW-Seite *FAP web* mit zahlreichen Informationen zu Frequenzzuweisungsproblemen (Bibliographie, Testinstanzen etc.) weiter gepflegt.

Ganzzahlige Optimierung Gemischt-ganzzahlige lineare Programme sind das wichtigste Modellierungswerkzeug in den meisten unserer Anwendungsprojekte. Aus diesem Grund betreiben wir auch intensive Forschungs- und Entwicklungsarbeit im Bereich der allgemeinen (gemischt-) ganzzahligen Optimierung. Aus dieser Arbeit sind zahlreiche allgemein verwendbare Software-Pakete hervorgegangen, die wir pflegen und weiterentwickeln. Ein wichtiger Aspekt ist derzeit die Integration von Methoden des Constraint Programming in Lösungsverfahren für gemischt-ganzzahlige Programme (in der Software SCIP). Dies ist insbesondere ein wichtiger Ansatz im Hinblick auf das Erkennen von Unzulässigkeiten und den Umgang mit

numerisch diffizilen Nebenbedingungen. Die entwickelten Methoden erweisen sich derzeit in einem gemeinsamen Projekt mit Infineon (gefördert durch das BMBF) zur Validierung von System-on-Chip-Entwürfen als sehr wertvoll. Neben weiteren Software-Paketen wie dem LP-Löser SoPlex, dem LP-Basisverifizierer perPlex und der Modellierungssprache Zimpl (samt Compiler) pflegen wir auch verschiedene Bibliotheken mit Testinstanzen (MIPLIB, SteinLib). In einem grundlagenorientierten Projekt untersuchen wir die kombinatorische Struktur von Verallgemeinerungen verschiedener 0/1-Probleme mit dem Ziel, die praktische Lösbarkeit von ganzzahligen Programmen mit nicht-binären Variablen zu verbessern. Hier haben wir im vergangenen Jahr erste interessante Rechenergebnisse erzielt.

Online-Optimierung In zahlreichen Planungsproblemen (z.B. im Transportwesen oder in der innerbetrieblichen Logistik) lässt sich die Entscheidungsphase nicht von der Durchführungsphase trennen. Man kann z.B. nicht eine Stunde lang Transportaufträge eines Personenaufzugs sammeln und dann eine Abarbeitungsreihenfolge ermitteln, in der man in der folgenden Stunde die Aufträge bedient. Solche Probleme sind Gegenstand der Online-Optimierung. In einem gemeinsamen Projekt mit dem ADAC haben wir z.B. Methoden entwickelt, die derzeit zur Einsatzplanung der Pannenhilfsfahrzeuge („Gelbe Engel“) verwendet werden. Ein wichtiger Aspekt der Arbeit im vergangenen Jahr war hier die Entwicklung von Verbesserungen für Hochlastsituationen. In unserem Projekt zur Optimierung von Lastaufzugsystemen bei eCom-Logistik (Herlitz PBS AG) konnten wir im Berichtszeitraum nachweisen, dass mit Reoptimierungsalgorithmen (die bereits getroffene Entscheidungen, soweit möglich und sinnvoll, revidieren) gegenüber gebräuchlichen Verfahren Verbesserungen erzielt werden können. Im Rahmen von Projekten der DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall* und des DFG-Forschungszentrums MATHEON haben wir mit probabilistischen Analysen und dem Konzept der relativen Politik-Evaluierung in Markov-Entscheidungsproblemen deutliche Fortschritte im grundlegenden Bereich der Bewertung von Online-Algorithmen gemacht. Der Erfolg der Arbeit im Schwerpunkt Online-Optimierung wird auch durch die Berufungen von Jörg Rambau (C4-Professur Bayreuth) und Tjark Vredeveld (Assistenzprofessur Maastricht, Niederlande) sowie durch den an Andreas Tuchscherer vergebenen Diplomarbeitspreis der GOR dokumentiert.

Verkehr Der Schwerpunkt Verkehr umfasst Projekte im öffentlichen Personennahverkehr, in der Einsatzplanung von Fluggesellschaften, der Auktionierung von Trassen für den Bahnverkehr sowie des LKW-Einsatzes. In verschiedenen Teilen des Bereichs Verkehr führt zunehmende Deregulierung zu immer mehr „Optimierungsdruck“. In unserem Projekt zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung haben wir im vergangenen Jahr u.a. für die Regensburger Verkehrsbetriebe Einsatzpläne errechnet, welche zu deutlichen Einsparungen führen. In Zusammenarbeit mit der Lufthansa Systems Berlin GmbH wurde intensiv an einer Übertragung unserer auf Set-Covering/Partitioning basierenden Methoden auf die Einsatzplanung von Flugzeugbesatzungen gearbeitet. Im Rahmen des MATHEON-Projekts *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr* haben wir im Berichtszeitraum vorwiegend Modelle zur Linien- und Preisplanung entwickelt. In Zusammenarbeit mit unseren Kooperationspartnern ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, Havelbus Verkehrsgesellschaft mbH und IVU Traffic Technologies AG wurden erste Testrechnungen zur Bestimmung von Linienplänen durchgeführt. In einem sechsmonatigen gemeinsamen Projekt mit DaimlerChrysler haben wir den Einsatz der heterogenen LKW-Flotte eines Speditionsunternehmens geplant. Das vom BMBF geförderte Projekt zum Management verteilter Lager (mit eCom Logistik) wurde im vergangenen Jahr erfolgreich abgeschlossen.

Der Bereich **Computer Science** umfasst vier Abteilungen: *High Performance Computing*, *IT Services*, *Operating* und *Computer Science Research*. Während die ersten drei Abteilungen überwiegend Dienstleistungen für die Wissenschaft anbieten, bearbeitet die vierte Abteilung, *Computer Science Research*, ausschließlich eigene Forschungsthemen. Ihr Forschungsspektrum reicht von systemnahen Arbeiten an HPC-Clustern bis zur Entwicklung komplexer Grid-Systeme für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Ressourcen. Das verbindende Element zwischen diesen beiden Themenkomplexen liegt in der effizienten Nutzung der Hard- und Softwarekomponenten für verteilte Rechenaufgaben. Auf den untersten Schichten aufbauend werden höherwertige Dienste entwickelt, die den effizienten, benutzerfreundlichen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen, was die Systemkosten deutlich reduziert. Einer neueren Untersuchung zufolge entfallen über 50% der Betriebskosten nicht auf Hard- und Software, sondern auf Löhne und Gehälter des Betriebs- und Wartungspersonals. In den vorangegangenen Jahren haben wir die beiden Schwerpunkte “Grid Computing” und “Cluster Computing” unterschieden. Da diese Bereiche thematisch sehr eng verwandt sind, wodurch sich Synergiepotential ergibt, haben wir sie im letzten Jahr zu einem einzigen Schwerpunkt “Verteilte Systeme und Anwendungen” zusammengeführt, den wir im Folgenden kurz umreißen.

Verteilte Systeme und Anwendungen. Die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme liegt im Zentrum unseres Forschungsinteresses. Ausgehend von den derzeit vorhandenen Grid-Systemen, die zumeist auf der Grundlage der mittlerweile gut verstandenen, traditionellen Client/Server-Architekturen entwickelt wurden, beschäftigen wir uns sowohl theoretisch als auch praktisch mit neuartigen Peer-to-Peer-Techniken. Diese haben den Vorteil einer potentiell unbegrenzten Skalierbarkeit, d.h. es können beliebig viele Nutzer gleichzeitig bedient werden. Da jeder neu hinzukommende Knoten auch zugleich partiell als Dienstleister fungiert, besteht ein hoher Grad an Ausfallsicherheit – sofern die verteilte Systemsoftware entsprechend konzipiert wurde. Auch die selbständige Konfiguration (z.B. bei Komponentenausfällen) wird durch den Einsatz von Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

In den drei Projekten GridLab, DataGrid und FlowGrid, die im 5. Rahmenprogramm von der EU gefördert wurden, haben wir weitestgehend die traditionellen Grid-Techniken weiterentwickelt und eingesetzt. Im 6. Rahmenprogramm arbeiten wir nun im EU-Projekt CoreGrid an neuartigen, auf den genannten Peer-to-Peer-Methoden aufsetzenden Systemarchitekturen. In einem weiteren, gleichfalls im Jahr 2004 angelaufenen EU-Projekt, GridCoord, sind wir auf politischer Ebene an der Abstimmung und Neuschaffung nationaler Förderstrategien für das Grid Computing beteiligt.

Seit etwa zwei Jahren konzentrieren sich unsere Forschungsarbeiten auf das Management sehr großer Datenmengen in verteilten Grid-Systemen. Unter der Bezeichnung *ZIB-DMS* entwickeln wir, basierend auf Peer-to-Peer-Techniken, skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung attributierter Dateien in verteilten Systemen. Mehrere Doktoranden, Diplomanden und Studenten arbeiten an dieser komplexen Thematik mit dem Ziel, eine Software zur Verwaltung von Millionen Dateien im Grid zu entwickeln. Da die Speicherknoten im Grid jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine geeignete Datenreplikation unabdingbare Voraussetzung. Wir entwickeln Methoden für Datenplatzierung, Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Zum praktischen Test unserer Datenmanagement-Verfahren dienen komplexe Anwendungen der Bioinformatik, die gleichfalls in der Abteilung Computer Science Research entwickelt

werden. Unsere Nachwuchsforschergruppe “Alignment und Threading auf parallelen Systemen” des Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik (BCB) konzipiert Algorithmen zur Strukturvorhersage von Proteinen, die nicht nur verteilt im Grid ablaufen, sondern auch auf sehr umfangreiche Datenmengen zugreifen. Im Berichtsjahr hat die Gruppe mit ihren neu entwickelten Strukturvorhersage-Algorithmen erstmals am CASP-Wettbewerb (Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction) teilgenommen.

2.2 Schwerpunkte

2.2.1 Molekulare Konformationsdynamik

Gitterfreie Methoden in der Konformationsdynamik

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Marcus Weber, Susanna Kube, Holger Meyer, Alexander Riemer

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) “Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening”, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A4

Die im Jahr 2003 eingeführte Robuste Perron Cluster Analyse [4], ein Clusteralgorithmus zur Identifizierung von metastabilen Konformationen, definiert Konformationen als Zugehörigkeitsfunktionen $\chi : \Omega \rightarrow [0, 1]$, wobei Ω der Raum aller möglichen Konformere (räumliche Anordnung der Atome) eines Moleküles darstellt. Durch diese Art der Definition gibt es Konformere $q \in \Omega$, die sich nicht eindeutig einer bestimmten metastabilen Konformation zuordnen lassen, was dem chemischen Verständnis von Übergangszuständen bzw. -bereichen entspricht. Das mengenbasierte Konzept wurde mathematisch gesehen durch ein funktionsbasiertes Konzept ersetzt. 2004 wurde dieses Konzept auch bis zur Diskretisierung des Raumes Ω durchgesetzt. Statt Ω wie bisher in Teilmengen zu zerlegen, wurde eine Partition der Eins im Funktionenraum durchgeführt. Die erhaltenen Basisfunktionen $\Phi_1, \dots, \Phi_s : \Omega \rightarrow [0, 1]$ dienen im Sinne einer Galerkindiskretisierung einerseits als Approximationsansatz für die Zugehörigkeitsfunktionen, andererseits werden sie auch verwendet, um das Abtasten des Konformationsraumes im Sinne einer gitterfreien Partitionierungsmethode zu verbessern.

Die algorithmische Umsetzung der gitterfreien Dynamik durch das Programmpaket ZIBgridfree ist in Abbildung 2.1 wiedergegeben [2]. ZIBgridfree wurde aufgrund der Basis-klassen von *amira/amiraMol* [1] implementiert. Neben den Konformationen selbst liefert diese Methode auch deren thermodynamische Gewichte und eine Matrix der paarweisen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Konformationen. Eine Interpretation der funktionsbasierten Konformationen als Makrozustände des Moleküls konnte ebenfalls hergeleitet werden. Dieser Ansatz bietet mehrere Vorteile, siehe [3]:

- Teilsamplings bezüglich verschiedener Ansatzfunktionen überlappen sich. Dadurch werden auch Übergänge zwischen den Konformationen simuliert. Das “trapping” in einzelnen metastabilen Mengen wird verhindert.
- Die Akzeptanzrate im HMC ist gegenüber mengenbasierten Methoden deutlich erhöht, da Samplingpunkte nicht außerhalb einer Menge liegen können und somit nicht verworfen werden müssen (keine “out of cluster rejection”).

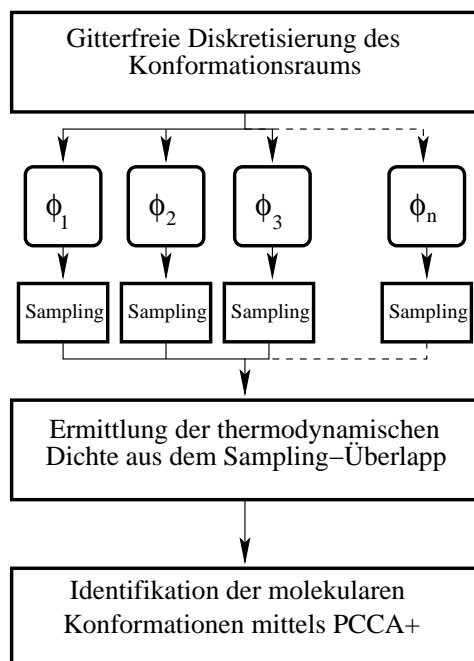


ABBILDUNG 2.1: Architektur des Programmpakets ZIBgridfree.

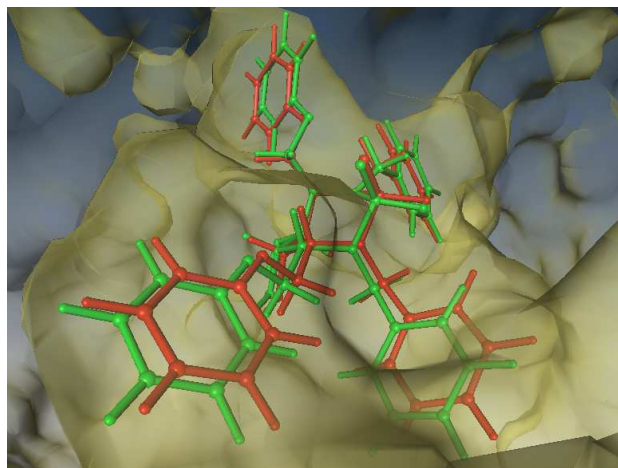


ABBILDUNG 2.2: Experimenteller und gedockter Zustand eines Peptids (RMS= 0.77 Å) in der Bindungstasche der HIV1 -Protease.

- Die Durchführung der Teilsamplings gestattet eine bequeme Parallelisierung des Prozesses.
- Die Zerlegung hochdimensionaler Konformationsräume in Untermengen führt oft zu dem sogenannten *Fluch der Dimensionen*. Mit der gitterfreien Diskretisierung kann man Strategien zur Vermeidung dieses Problems entwickeln.
- Da zur Approximation der Konformationen und zum partitionierten Sampling dieselbe Funktionsbasis verwendet wird, gelang es in [3], die Konvergenzgeschwindigkeit der Teilsamplings in Relation zu setzen mit dem Approximationsfehler der Konformationen durch die Basisfunktionen. Dieses erlaubt adaptive Verfeinerungsstrategien, die in einer zukünftigen Version des Algorithmus umgesetzt werden sollen.

Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening

Bearbeitet von: Frank Cordes, Peter Deuffhard, Alexander Steidinger, Antje Wolf, Sebastian Moll

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) "Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening"

Der Aufbau von Konformationsdatenbanken für Wirkstoffmoleküle ist ein notwendiger Bestandteil des strukturbasierten Screenings, da pharmazeutische Molekülbibliotheken in der Regel nur topologische Information enthalten. Im Berichtszeitraum wurden mit Hilfe der bisher entwickelten Uncoupling/Coupling Monte Carlo Methode und der sukzessiven Perron Cluster Analyse metastabile Konformationsbereiche für Auszüge bekannter pharmazeutischer Bibliotheken (Chembridge, Maybridge, NCI) identifiziert. Repräsentanten dieser Bereiche die-

nen als Eingabe für semiflexible Dockingstudien, in denen der Ligand durch kleine Konformationsänderungen innerhalb des aktiven Zentrums des Targetmoleküls in den Bindungsmodus überführt werden kann. Wird der Dockingalgorithmus mit einer Konformation gestartet, die dem Bindungsmodus ähnelt, kann in vielen Fällen die experimentelle Komplexstruktur mit einer Genauigkeit von etwa 1Å RMS vorhergesagt werden (siehe Abbildung 2.2).

Im Unterschied zu konventionellen Strategien, die für das Screening vorab Konformationsensembles aufbauen, werden am ZIB durch die thermodynamische Generierung der Konformationen nicht nur Informationen zu den lokalen Minima generiert, sondern die Metastabilitätsanalyse des gesamten Konformationsraums [4] beinhaltet auch die angeregten Übergangsbereiche. Angeregte Zustände, die durch die Bindung an ein Protein stabilisiert würden, können nicht übersehen werden. Außerdem sollen die thermodynamischen Gewichte der metastabilen Konformationen in die Bewertung des Dockings einbezogen werden.

Der neue thermodynamische Ensembleansatz ist mit einer erhöhten Datenproduktion verbunden und läßt sich in ein "Virtuelles Screening" nur mit Hilfe einer geeigneten Datenbank einbinden. Auf konventionelle Konzepte konnte hier nicht zurückgegriffen werden, da sich diese in der Regel nur auf die topologischen Daten der Moleküle konzentrieren. Das neu entwickelte Konzept repräsentiert Moleküldaten durch Graphen, deren Knoten und Kanten gespeichert werden. Unter der Verwendung des aus dem Text Retrieval bekannten Vektorraummodells ergibt sich ein kanonisches Ähnlichkeitsmaß der Moleküle. Es werden aber auch Varianten davon eingesetzt. Die Konzentration auf lokale Information ist sicherlich eine Beschränkung der Repräsentation (siehe Virtuelles Moleküllabor), stellt jedoch vor dem Hintergrund sehr großer, pharmazeutischer Molekülbibliotheken eine notwendige Reduktion des Such- und Speicheraufwands dar.

Die Datenbank sowie die notwendigen Simulations- und Analyseprogramme sind über ein Webportal für externe Anwender zugänglich (<http://elfie.bcbio.de:8080/web/home>). Das Portal wurde in Kooperation mit K. Polthier durch ein JavaView Paket erweitert, das eine schnelle visuelle Kontrolle der Moleküldaten über einen beliebigen Webbrowser erlaubt. Das Portal "Konformationsdatenbanken und Virtuelles Screening" wird zur Zeit für intensive Dockingstudien und zum Aufbau einer empirischen Scoringfunktion genutzt, die eine Ergänzung zu der am ZIB entwickelten Kraftfeld basierten Solvatisierungsfunktion [7] darstellt.

Spektrale Clusteralgorithmen

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Marcus Weber

Kooperationspartner: Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, AG Martin Vingron, Alexander Schliep, Wasinee Rungsaritvotin

In der Robusten Perron Cluster Analyse (PCCA) [4] wird die Clusterung durch eine lineare Abbildung der Eigenvektordaten einer stochastischen Matrix in ein Simplex beschrieben. Im Berichtszeitraum gelang der Nachweis [5], dass Daten, die aus einer Diskretisierung eines Übergangsoperators in der Moleküldynamik stammen, tatsächlich Simplexstruktur aufweisen. Bei der Robusten Perron Cluster Analyse wird eine Clusterung als Startschätzung verwendet, die im allgemeinen einen Optimalwert hinsichtlich einer Zielfunktion annimmt, aber nicht zulässig ist. Im gegebenen Fall von vorhandener Simplexstruktur ist die Startschätzung jedoch *fast* zulässig. Der Grad der Zulässigkeit kann mit Hilfe des sogenannten MinChi-Indikators [6] ausgewertet werden. Dieser Indikator kann verwendet werden, um über die Zahl vorhandener Cluster zu entscheiden, wenn das Spektrum der stochastischen Matrix keine eindeutigen Rückschlüsse zulässt.

In einer Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik (MPIMG) ist es gelungen, einen Zusammenhang zwischen der Robusten Perron Cluster Analyse und anderen spektralen Clusteralgorithmen zur Graphenpartitionierung herzustellen, siehe [6]. Es hat sich gezeigt, dass dieser Indikator im Vergleich zu anderen Indikatoren auch bei verrauschten Daten, d.h. bei stochastischen Matrizen mit Spektren, die keinen deutlichen Perron-Cluster von Eigenwerten nahe 1 aufweisen, gute Ergebnisse erzielt.

Neben der Untersuchung des MinChi-Indikators wurde die Robuste Perron Cluster Analyse in der Kooperation mit dem MPIMG auch auf Genexpressionsdaten angewendet. Die Clustering dieser Daten liefert eine Trennung zwischen zwei Brustkrebs-Patientengruppen, von denen eine Gruppe eine deutlich erhöhte Sterberate aufweist.

Die PCCA hielt hierbei dem Vergleich mit anderen Clusteralgorithmen methodisch gut stand. Hinsichtlich der Erzeugung der Startschätzung zur Auswertung des MinChi-Indikators ist sie jedoch einfach zu implementieren und numerisch effektiv. Bei gegebenen Eigenvektoren mit jeweils n Komponenten, hat sie eine $O(n)$ Laufzeit.

Die in der PCCA ausgenutzte Simplexstruktur der Eigenvektordaten existiert auch bei den Singulärvektoren von rechteckigen Dokument-Text-Matrizen, wie sie z.B. in Suchmaschinen im Internet Verwendung finden, siehe [5]. Zukünftig soll daher untersucht werden, ob die Singulärvektoren im nicht-reversiblen Fall in der Moleküldynamik Anwendung bei der Clustering finden können.

Virtuelles Moleküllabor

Bearbeitet von: Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Maro Bader, Christian Schudoma, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: AG Schütte (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik), Nachwuchsgruppe (BCB/ZIB) "Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern", Nachwuchsgruppe (BCB/HU) "3-D strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement", AG Giovanni Galizia (Riverside, Kalifornien, USA), Mercury Computer Systems GmbH, Berlin

Förderung: Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB) "Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening"

MULTIPLE SEMI-FLEXIBLE ÜBERLAGERUNG MOLEKULARER STRUKTUREN Die Suche nach neuen Medikamenten in Datenbanken steht häufig vor dem Problem, Wirkstoffmoleküle mit ähnlicher Funktion zu selektieren. Der strukturelle Vergleich von Molekülen dient der Identifikation struktureller Ursachen für funktionelle Ähnlichkeit, deren Kenntnis für die Weiterentwicklung von Medikamenten genutzt werden kann. Aufgrund der Flexibilität der Moleküle müssen in einem strukturellem Vergleich alle wesentlichen Formen eines Moleküls berücksichtigt werden.

Der im Vorjahreszeitraum (2003) entwickelte Algorithmus setzte an dieser Stelle an, hatte aber einige Nachteile. Zum einen konnten mit erträglichen Laufzeiten nur relativ kleine oder extrem gut aufeinander passende Teilstrukturen gefunden werden. Zum anderen war das Zusammenführen der Teilstrukturen vieler Moleküle ein Problem. Im Berichtszeitraum wurde der Algorithmus erheblich verbessert. Wie bisher wird zum Vergleich von N Molekülen eines als Referenzmolekül spezifiziert, mit dem die restlichen $N - 1$ Moleküle paarweise verglichen werden, ein $O(N)$ -Prozess. Die Ergebnisse des paarweisen Vergleichs werden anschließend zusammengeführt, wobei kleinere Teilstrukturen entstehen, die von mehreren Molekülen geteilt werden. Folgende Änderungen wurden vorgenommen [8]:

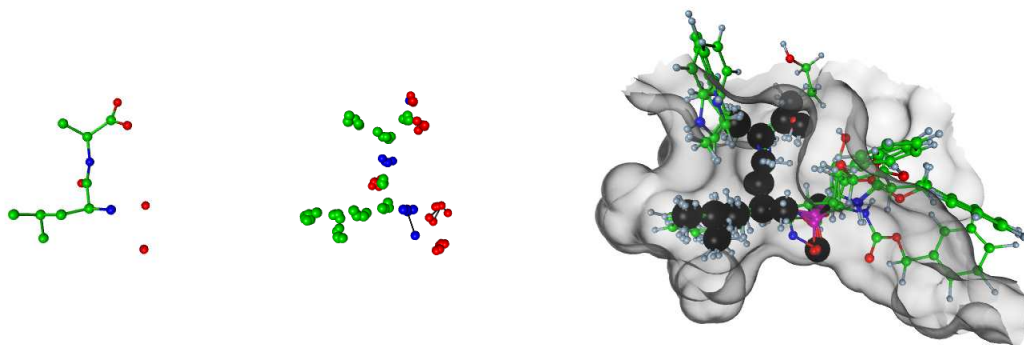


ABBILDUNG 2.3: Beste Überlagerung der aktiven Konformationen von 6 Thermolysin-Inhibitoren. Links: Teilstruktur des Referenzmoleküls. Mitte: Teilstrukturen aller Inhibitoren. Die schwarzen Linien zeigen die Atomzuordnung, wo nicht klar ersichtlich. Rechts: Inhibitoren in der Bindungstasche. Die Teilstruktur ist durch schwarzen Atome angezeigt.

Der Clique-Erkennungsalgorithmus, der allein für den paarweisen Vergleich verantwortlich war, wurde in der Arbeitsgruppe J. Prömel (HU Berlin) durch eine Kombination aus Clique-Erkennung und iterativer Überlagerungssuche ersetzt. Clique-Erkennung wird nun nur noch für die Suche kleiner gemeinsamer Teilstrukturen verwendet, die dann durch eine schnelle Greedy-Strategie erweitert werden, wobei die ursprüngliche Zuordnung der Atome sich noch ändern kann. Als Ergebnis werden nun bei gleicher Laufzeit deutlich größere gemeinsame Teilstrukturen gefunden. Zur Bewertung einer Überlagerung wurde die vom Kooperationspartner R. Preissner verwendete Scoring-Funktion um Gewichte erweitert, so dass bindungsrelevante Atomzuordnungen bevorzugt werden. Die Einführung von Überlagerungsbäumen [8] erlaubt es, identische Teilstrukturen in Zeit $\mathcal{O}(n)$ zu finden, wobei n die Anzahl der betrachteten Atome des Referenzmoleküls ist. Im Vergleich zu anderen Algorithmen, die Pseudoatome (Zusammenfassung von Atomgruppen) einführen, um die Komplexität des Problems zu reduzieren, ermöglicht der in [8] beschriebene Algorithmus die volle Berücksichtigung der molekularen Struktur, insbesondere der räumlichen Ausdehnung, bei gleichzeitiger Berücksichtigung der chemisch-physikalischen Eigenschaften.

Der Algorithmus wurde an einigen Modell-Systemen getestet, so z.B. an 6 Thermolysin-Inhibitoren. Die aktiven Konformationen der Inhibitoren wurden aus folgenden PDB-Einträgen extrahiert: *4TMN* (Referenzmolekül), *1TMN*, *5TMN*, *6TMN*, *1TLP* und *5TLN*. Die Ergebnisse (Abbildung 2.3) zeigen, dass alle Inhibitoren mit der gefundenen Überlagerung sehr gut in das aktive Zentrum passen. Die so gefundenen Positionen stimmen sehr gut mit den Kristallstrukturen überein.

VISUALISIERUNG MOLEKULARER ZUSTANDSMENGEN. Die bisherige Strategie zur Visualisierung molekularer Zustandsdichten und insbesondere metastabiler Konformationen [1] stützt sich auf die Annahme einer Verteilung mit *Zentralcharakteristik*. Eine Verteilung mit einem Zentrum hoher Wahrscheinlichkeit und einer Peripherie mit geringer Wahrscheinlichkeit. Die Berechnung einer mittleren Molekülform ist eine Reduktion auf das Zentrum, das Akkumulieren einer Konfigurationsdichte hebt lediglich das Zentrum stark hervor.

Da molekulare Zustandsdichten jedoch typischerweise mehrere Zentren mit hoher Wahrscheinlichkeit haben, entstehen häufig Darstellungen, die teilweise chemisch unrealistisch sind.

Die direkte Anwendung der obigen Strategien versucht aus mehreren ein einziges Zentrum zu konstruieren. Um einen differenzierteren Einblick zu erlangen, müssen die Zentren voneinander getrennt werden. Mit Hilfe der Perron-Cluster-Analyse ist eine Trennung nur dann möglich, wenn eine starke Metastabilität besteht.

Um die multimodale Struktur molekularer Zustandsdichten quantisieren und visualisieren zu können, wurden Module zur analytischen Approximation durch eine Konvexkombination einfacher Verteilungen mit Zentralcharakteristik entwickelt. Für die im Fall von Molekülen besonders relevanten Torsionswinkel wird als einfache Verteilung die von-Mises-Verteilung verwendet. Als Gesamtmodell ist sowohl eine Konvexkombination als auch ein Hidden-Markov-Modell verfügbar. Im zweiten Fall wird nicht nur die Verteilung sondern auch dynamische Information über das Molekül, die im Ergebnis einer HMC-Simulation enthalten ist, berücksichtigt. Die Bestimmung der Modellparameter erfolgt mit dem Expectation-Maximization-Algorithmus bzw. dessen Spezialfall dem Baum-Welch-Algorithmus.

Die Parameter des so bestimmten Modells beschreiben das Ausmaß der Variabilität eines Moleküls und ihre Verteilung auf die verschiedenen Freiheitsgrade. Diese Information kann für die Darstellung genutzt werden, um die Variation verschiedener Freiheitsgrade getrennt voneinander darzustellen. Durch Identifikation stabiler Teilstrukturen kann ein besseres Alignment und so eine klarere Darstellung erreicht werden.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Numerische Integration im HMC Kontext (Ulrich Nowak, Marcus Weber, Peter Deuffhard)

Im Berichtszeitraum wurden Arbeiten zur Effizienzuntersuchung von numerischen Integrationsverfahren im speziellen Kontext von HMC-Methoden aufgenommen. Bisher stand als Löser für die Trajektorienberechnung lediglich das weitverbreitet Verlet-Verfahren zur Verfügung. Als erste Alternativen wurden spezielle Varianten des adaptiven Extrapolationsverfahrens DIFEX2 und ein symplektisches Runge-Kutta-Nyström Verfahren 4. Ordnung implementiert und getestet.

Ausführliche Untersuchungen anhand von verschiedenen, vergleichsweise kleinen Modellmolekülen zeigten, daß weder mit adaptiven, fehlerkontrollierenden Verfahren noch mit symplektischen Verfahren höherer Ordnung ein Effizienzgewinn erzielt werden kann. Um die Akzeptanzrate der HMC-Schritte nahe bei 1 zu halten, muss bei wachsender Systemgröße die Gesamtenergie genauer als bisher berechnet werden. Ein erster Vergleich der Verfahren an einem größeren Molekül zeigt, daß das symplektische Verfahren höherer Ordnung bei gleichem Aufwand größere Akzeptanzraten liefert, vgl. Tabelle 2.1. Das nicht-symplektische Extrapolationsverfahren stellt hingegen keine Alternative dar.

Erste Schritte zur expliziten Berechnung von gestörten Hamiltonsystemen, zu denen die numerische Lösung einer symplektische Diskretisierung die exakte Lösung ist, wurden unternommen. Nach einem Ansatz von S. Reich sollte sich durch die Verwendung von Approximationen dieser gestörten Hamiltonfunktion im Rahmen von sog. SHMC-Verfahren die Akzeptanzrate ohne großen Zusatzaufwand erhöhen lassen.

Methode	nfcn	CPU(s)	Rate	$ \overline{\Delta H} $
Verlet	4000	843	0.39	3.5
	6000	1120	0.64	1.3
	8000	1527	0.81	0.63
	12000	2204	0.83	0.25
SRKN4	6000	1172	0.67	0.86
	8000	1548	0.98	0.11
	12000	2273	1.00	0.015
DIFEX2	20286	4035	0.61	1.1

Tabelle 2.1: Aufwandsvergleich verschiedener Integratoren im HMC Kontext

RNA 3D-Modellierung (Christian Schudoma, Patrick May, Frank Cordes, Hans-Christian Hege; Kooperation: Tobias Höllerer, Luc Jaeger, Helly Kwee (University of California, Santa Barbara, USA), Knut Reinert, Markus Bauer, Gunnar Klau AG (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Algorithmische Bioinformatik))

Im Rahmen einer Bachelorarbeit [9] wurde das bereits im letzten Jahresbericht beschriebene Amira-Modul überarbeitet. Für die Suche eines geeigneten Template-Moleküls zur Modellierung der Struktur einer RNA-Anfragesequenz wurde ein an der Technischen Universität Wien (Arbeitsgruppe "Algorithmen und Datenstrukturen") und Freien Universität Berlin (Arbeitsgruppe "Algorithmische Bioinformatik") gemeinsam entwickeltes Verfahren auf Basis der Lagrange-Relaxierung verwendet, welches die ursprünglich eingesetzte, nicht-deterministische Suche ersetzt. Aus der Verwendung dieses Verfahrens ergab sich eine Kooperation mit der FU-Arbeitsgruppe "Algorithmische Bioinformatik" von K. Reinert. Mit dem neuen Verfahren konnte ein deutlicher Geschwindigkeits- und Robustheitsgewinn in der tRNA-Strukturmodellierung ausgemacht werden. Weiterhin konnte die Kooperation mit der Arbeitsgruppe Jaeger, Höllerer der University of California, Santa Barbara ausgebaut werden. Dort werden Verfahren zur RNA-Strukturmodellierung in AmiraMol implementiert und sollen für das tecto-RNA Projekt von L. Jaeger verwendet werden.

Hardware Beschleunigung für freie Energie Berechnung (Timm Baumeister, Frank Cordes, Hans-Christian Hege; Kooperation: Mercury Computer Systems (Berlin und Chelmsford, USA))

In der Kooperation mit Mercury Computer Systems sollen geschwindigkeitsbestimmende Schritte in der Berechnung der freien Energie von Molekülen identifiziert und unter Verwendung geeigneter Hardware-Komponenten (Mercury) signifikant beschleunigt werden. Zunächst wurde mit einer Evaluierung existierender Algorithmen und Programme begonnen, um die Anforderungen an die Hardware Algorithmen- und Softwareübergreifend zu klassifizieren. Gleichzeitig wurde der geschwindigkeitsbestimmende Schritt, die Berechnung der nicht-bindenden Wechselwirkungen, in der ZIB-eigenen Software zur Simulation von Konformationsdynamik näher untersucht und damit begonnen, diesen Schritt durch notwendige thermodynamische Modellierungsansätze zu erweitern.

Publikationen

- [1] J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum, H.-C. Hege. Visualizing dynamic molecular conformations. In *Proceedings of IEEE Visualization 2002*, 235–242, 2002.

- [2] H. Meyer. HuMFree – eine gitterfreie Methode zur Konformationsanalyse von Wirkstoffmolekülen. Vorarbeiten für eine Masterarbeit.
- [3] M. Weber. Meshless Methods in Conformation Dynamics. Vorarbeiten für eine Dissertation.
- [4] P. Deuffhard, M. Weber. Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics. Lin. Alg. App. 398c, 161–184, 2005.
- [5] M. Weber. Clustering by using a simplex structure. Report 04-03, ZIB, 2004.
- [6] M. Weber, W. Rungtarityotin, A. Schliep. Perron Cluster Analysis and Its Connection to Graph Partitioning for Noisy Data. Report 04-39, ZIB, 2004.
- [7] T. Baumeister, F. Cordes. A new Model for the Free Energy of Solvation and its Application in Protein Ligand Scoring. Report 04-51, ZIB, 2004.
- [8] D. Baum. Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules. Report 04-52, ZIB, 2004.
- [9] C. Schudoma. Application of a combined sequence and structure alignment for RNA 3D Modeling, Bachelor Thesis, Bioinformatics FU Berlin, 2004.

2.2.2 Nano-Optik

Im Schwerpunkt *Nano-Optik* haben wir die in den Vorjahren entwickelten Ansätze zur Lösung industrierelevanter Probleme konsequent weiterverfolgt. Durch die gleichzeitige Beteiligung im Bereich “Elektronische Schaltkreise und optische Technologien” des DFG-Forschungszentrums MATHEON “Mathematik für Schlüsseltechnologien” und am BMBF-Verbundprojekt “Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation” sind wir in der sehr günstigen Lage, gleichzeitig mathematisch-algorithmische Konzepte voranzutreiben und diese unmittelbar an aktuellen technologischen Problemen zu testen. Die dabei entstehenden Synergieeffekte befruchten sowohl die theoretische als auch die anwendungsorientierte Seite unserer Arbeit. Insbesondere im Anwendungsschwerpunkt Photonische Kristalle verwenden unsere Kooperationspartner die von uns entwickelte Software zum Entwurf und zur Optimierung integriert-optischer Komponenten. Für Industriepartner bietet das ZIB-Spin-Off Unternehmen JCMwave GmbH kommerzielle Softwarelösungen an.

Entwicklung leistungsfähiger Simulationsprogramme für das Design dreidimensionaler photonischer Kristalle

Bearbeitet von: Frank Schmidt, Sven Burger, Roland Klose, Lin Zschiedrich

Kooperationspartner: Alfred Forchel (Julius-Maximilians-Universität, Würzburg), Jan-Robert van Look und Helmut Heidrich (Fraunhofer Institut für Nachrichtentechnik, Heinrich-Hertz-Institut, Berlin), Christian Herrmann und Ortwin Hess (University of Surrey, London, England), Cecile Jamois und Thorsten Geppert (Max-Planck-Institut für Mikrostrukturtechnik, Halle), Andreas von Rhein und Ralf Wehrspohn (Universität Paderborn), Reinhard März (Infineon Technologies AG, München), Christoph Wächter und Dirk Michaelis (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, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9

In diesem Projekt werden in Zusammenarbeit mit Partnern aus der Industrie und aus Forschungsinstituten Simulationsumgebungen entwickelt, die die numerische Untersuchung von photonischen Kristallen (PhC) ermöglichen. Photonische Kristalle sind künstlich hergestellte periodisch strukturierte Materialien mit neuartigen optischen Eigenschaften. Diese ermöglichen vielfältige Anwendungen in der Kommunikationstechnik. Vorgeschlagen und zum Teil bereits realisiert wurden unter anderem miniaturisierte optische Elemente zur Dispersionskontrolle, zur Strahlungserzeugung (integrierte Lasersysteme) und als frequenzselektive Elemente [1, 4].

Für das Design dieser Komponenten wurde am ZIB ein auf 3D adaptiven vektorialen Nédélec Elementen beruhendes Finite-Elemente-Verfahren [2, 3] und zugehörige schnelle Löser entwickelt. Bereits im vorangegangenen Jahresbericht wurde gezeigt, dass dieses Verfahren etablierten Methoden um mehrere Größenordnungen hinsichtlich Genauigkeit und Rechenzeit überlegen ist.

Neben der Weiterentwicklung des schnellen Finite-Elemente-Lösers für Banddiagramme photonischer Kristalle lag im Berichtszeitraum der Schwerpunkt auf der Simulation technologisch relevanter Komponenten. Ein Beispiel hierfür ist die Bestimmung von Eigenmoden in photonischen Kristall-Wellenleitern (PhC-Wellenleiter). Diese spielen in der Miniaturisierung integriert optischer Komponenten eine wichtige Rolle, da sie prinzipiell Wellenleitung mit geringen Krümmungsradien der leitenden Strukturen ermöglichen. Außerdem können sie auch als Dispersionskompensatoren in Glasfaser-Netzen Anwendung finden [2, 3].

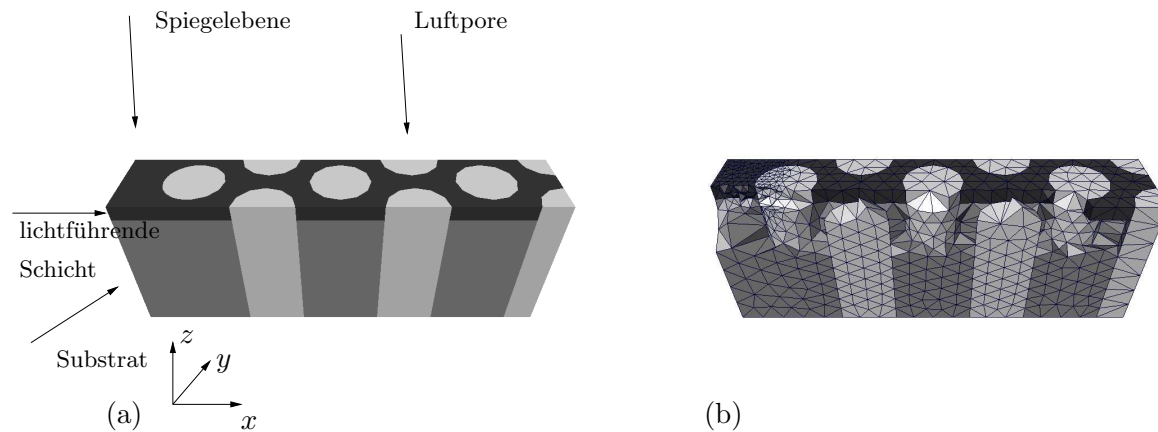


ABBILDUNG 2.4: (a) Geometrie der reduzierten Einheitszelle eines photonischen-Kristall-Wellenleiters (dunkelgrau: lichtführende Schicht, grau: Substrat, hellgrau: zylindrische Luftporen). (b) Visualisierung der Diskretisierung der Geometrie mit Hilfe von Tetraedern.

In Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer Institut für Angewandte Optik, Jena, und dem Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik, Halle, wurden PhC-Wellenleiter in Schicht-

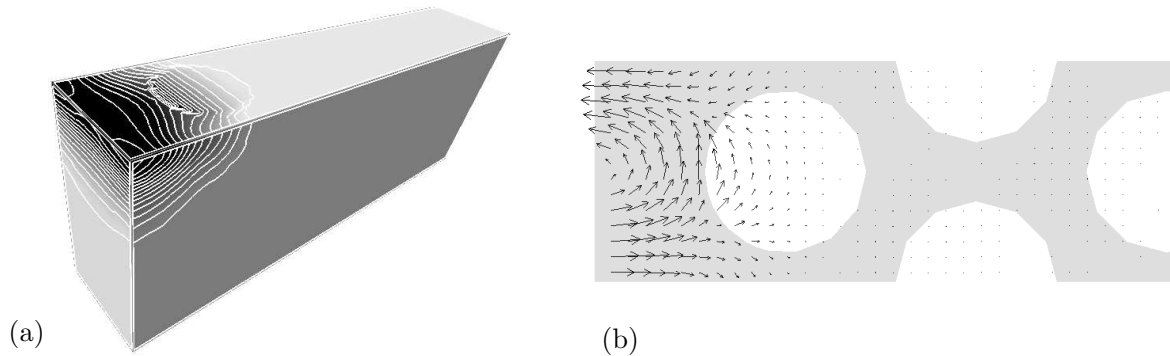


ABBILDUNG 2.5: (a) Betrag des elektrischen Feldes eines geführten TE-artigen Mode in einer Graustufen-Darstellung (schwarz: hohe Intensität). (b) Querschnitt durch die vektorielle \vec{E} -Feld-Verteilung in der oberen Spiegelebene ($z = \text{const.}$). Die Materialverteilung ist zusätzlich angedeutet.

wellenleitern untersucht. Bei diesen Elementen wird das Licht in einer Raumdimension durch Totalreflexion geführt, in einer weiteren Raumdimension durch Reflexion an einem 2D photonischen Kristall, in der dritten Raumdimension ist die Propagation entlang einer Defektreihe im 2D photonischen Kristall möglich.

Wegen der Symmetrie des Problems lässt sich das Rechengebiet auf ein Viertel einer Einheitszelle der periodischen Struktur begrenzen. Dieses reduzierte Rechengebiet ist in Abbildung 2.4(a) dargestellt. Die führende Schicht ist dunkelgrau, das Substrat grau und die Luft-Poren des photonischen Kristalls sind hellgrau dargestellt. Im linken Bereich des Rechengebiets wird der Wellenleiter durch eine fehlende Reihe von Luftporen erzeugt. Abbildung 2.4(b) zeigt einige der Tetraeder-Elemente der Diskretisierung der Geometrie (ca. 10^4 Tetraeder).

Abbildung 2.5 zeigt eine spezifische geführte Lichtmode in dieser Struktur, in Abbildung 2.5(a) ist die Amplitude des elektrischen Feldes der Mode in einer Graustufen-Darstellung abgebildet, Abbildung 2.5(b) zeigt die vektorielle Lösung in einer Schnittebene durch die 3D Geometrie.

Streuung auf unbeschränkten Gebieten mit inhomogenem Außenraum

Bearbeitet von: Sven Burger, Achim Schädle, Frank Schmidt, Lin Zschiedrich

Kooperationspartner: Vahid Sandoghdar, ETH Zürich, Schweiz; Thomas Kalkbrenner, FOM-Institute for Atomic and Molecular Physics (AMOLF), Amsterdam, Niederlande; Carsten Henkel, Universität Potsdam

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9, BMBF-Projektverbund: Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation

Eine der großen Herausforderungen in der Nanooptik ist die Simulation der Streuung elektromagnetischer Wellen an Strukturen im Subwellenlängenbereich unter Berücksichtigung eines inhomogenen Außenraumes. Für derartige Probleme haben wir in den letzten Jahren Theorie und Algorithmen basierend auf dem Polbedingungskonzept [7] entwickelt.

Unter einer Vielzahl von 2004 in dieser Problemklasse durchgeführten numerischen Simulationen wird im Folgenden exemplarisch eine neuartige Mikroskopietechnik, die an der ETH Zürich entwickelt wurde, vorgestellt. Für diese konnte mit Hilfe unserer numerischen Simulationen die Interpretation der Messergebnisse geklärt werden.

In der Mikroskopie werden üblicherweise die von der Probe emittierten Photonen gesammelt und gemessen. Mit dem neuen Verfahren wird nicht mehr die Interaktion der Photonen mit der Probe gemessen, sondern Änderungen des Spektrums einer Nanoantenne, die sich in der Nähe der Probe befindet. Als Nanoantenne dient ein Goldpartikel von 100nm Durchmesser. Die zu untersuchende Probe, hier eine 8nm dicke Chromschicht mit kreisrundem Loch, wird mit einem Abstand von 10nm unter diesem Partikel durchgeföhren. Das Partikel wird dabei schräg von links mit weißem Licht beleuchtet. Der oben beschriebene Versuchsaufbau ist schematisch im linken Teil der Abbildung 2.6 gezeigt. Im rechten Teil der Abbildung 2.6 ist eine Aufnahme der Probe zu sehen. Mit einem Mikroskop wird das transmittierte Licht detektiert und für jede Position der Probe spektral zerlegt.

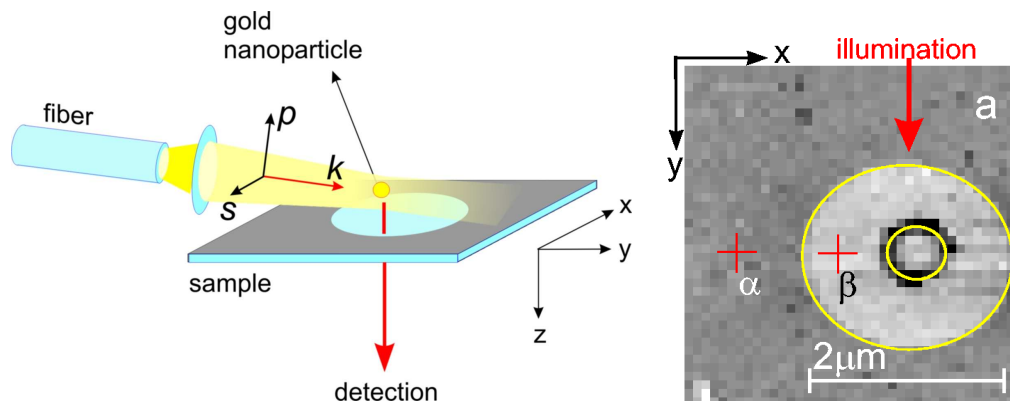


ABBILDUNG 2.6: Schematischer Aufbau des Mikroskopes (linke Seite). Rechte Seite: Mikroskopisches Bild der Probe. Mit freundlicher Genehmigung von Vahid Sandoghdar.

Anhand dieser Spektren wird positionsabhängig die Verschiebung der Resonanzwellenlänge und Linienbreite bestimmt. Hierbei treten – bei Einfall des Lichtes von links – Oszillationen auf, wenn sich das Partikel über der Chromschicht befindet und auf den linken Rand des Loches zubewegt. Aufgabe des Projektes war die Untersuchung dieser unerwarteten Oszillation. Zur Klärung, ob es sich hierbei um einen physikalischen Effekt handelt, oder diese Oszillationen durch andere Faktoren, etwa die Messung, bedingt sind, wurde der Versuch numerisch simuliert.

Zur Reduktion des Rechenaufwands wurde ein 2D Modell gewählt. Ein Ausschnitt der zweidimensionalen Geometrie, das Rechengebiet, ist in Abbildung 2.7 gezeigt.

Gelöst werden die zeitharmonischen Maxwellgleichungen für das magnetische Feld H_z senkrecht zum Rechengebiet. Das einfallende Feld wird als ebene Welle modelliert. Das Rechengebiet wird dadurch beschränkt, dass am Rand eine spezielle PML-Methode verwendet wird, die den geschichteten Außenraum berücksichtigt [5]. Diese Methode wurde in den beiden Softwarepaketen *JCMfertools* und *HelmPole* [6] realisiert.

In der numerischen Simulation treten über der Probe ebenso wie im Experiment Oszillationen der Resonanzwellenlänge und Linienbreite auf. Diese Oszillationen sind also kein Artefakt

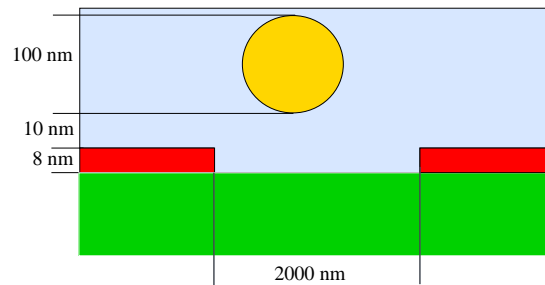


ABBILDUNG 2.7: Rechengebiet mit Geometrie – Vakuum (hellblau/hellgrau), Substrat (grün/grau), Chromschicht (rot/dunkelgrau), Goldpartikel (gelb/mittelgrau). Man beachte, dass die Darstellung stark verzerrt ist und die wirklichen Größenverhältnisse nicht wiedergibt.

der physikalischen Messungstechnik, sondern sind charakteristisch für das Experiment. Um dieses qualitative Resultat auch zu quantifizieren, müsste die Simulation auf 3D Geometrien erweitert werden, was im gegenwärtigen Stadium jedoch noch nicht geplant ist.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Eigenlösung der Maxwellgleichungen auf unbeschränkten Gebieten (Frank Schmidt, Roland Klose, Lin Zschiedrich; Kooperation: Thorsten Hohage, Universität Göttingen; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Schwerpunkt dieses Projektes war die Erweiterung der in den vergangenen Jahren in unserer Arbeitsgruppe entwickelten modifizierten PML-Methode auf 3D Maxwell-Eigenwertprobleme, sowie die softwaretechnische Realisierung innerhalb der C++ - Finite-Elemente-Plattform *JCMfertools*. Hierbei wurden die Grundlagen für eine erstmalige Umsetzung der Laplace-Domain-Methode in 3D gelegt.

Ein weiterer Schwerpunkt war die Analyse und Implementierung eines modifizierten Döhler Algorithmus zur Eigenwertberechnung. Dazu wurde ein Multi-Level-Algorithmus für die Vorkonditionierung des schwach besetzten Eigenwertproblems implementiert und ein Verfahren für die Elimination von Lösungsanteilen, die die Divergenzbedingung an elektromagnetische Wellen (Maxwell-Gleichungen) verletzen, entwickelt. Die Elimination basiert auf einem Projektionsschritt. Auswirkungen der nur näherungsweise durchgeführten Projektion auf die Stabilität des Verfahrens wurden theoretisch untersucht. Desweiteren wurden hierarchische finite Elemente beliebiger Ordnung für 0- und 1-Formen implementiert.

Iterative Löser für indefinite Gleichungssysteme (Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Kooperation: Martin Gander, Universität Genf, Schweiz; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Bei der Diskretisierung der zeitharmonischen Maxwellgleichungen mit einem Galerkinansatz und finiten Elementen erhält man große dünn besetzte indefinite unsymmetrische lineare Gleichungssysteme. Die Lösung dieser Gleichungssysteme ist bei der Berechnung elektromagnetischer Felder in zwei Raumdimensionen der zeitaufwändigste Teil.

Bekannte und weitverbreitete Vorkonditionierer wie Mehrgitterverfahren und Gebietszerlegungsalgorithmen, die für positiv definite Gleichungssysteme hervorragend funktionieren, arbeiten im vorliegenden Fall nicht mehr optimal oder versagen gänzlich.

Im Berichtszeitraum wurden einerseits verschiedene iterative Gleichungssystemlöser in *JCMfertools* implementiert. Ein neuartiges Verfahren basierend auf einem neu-gestarteten Zeitbereichs-Vorkonditionierer stellte sich als sehr geeignet für die Simulation typischer optischer Probleme heraus.

Andererseits wurden spezielle an der Physik orientierte Gebietszerlegungsalgorithmen untersucht. Im Gegensatz zu den weit verbreiteten und für positiv definite Probleme erfolgreichen Gebietszerlegungsalgorithmen, die an den Gebietsrändern Dirichlet- und/oder Neumannbedingungen koppeln, findet nun der Informationsaustausch zwischen Nachbargebieten mit Hilfe der Approximation der DtN-Abbildung statt. Dadurch ist es möglich, die in einem Teilgebiet gestreute Welle in die Nachbargebiete einzukoppeln. Neben Ergebnissen für ein an photonischen Kristallen orientiertes Modellproblem wurde hierfür eine erste Variante für eine lineare Zerlegung der Gebiete implementiert.

Resonanzen in offenen Systemen (Frank Schmidt, Lin Zschiedrich, Roland Klose; Kooperation: Thorsten Hohage, Universität Göttingen; Werner Koch, DLR-Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik Göttingen; Förderung: DFG-Projekt “Resonanzen in offenen Systemen” (mit T. Hohage))

Resonanzen sind Eigenschwingungen von Körpern, die in den Umgebungsraum des Resonanzkörpers abstrahlen und somit, wenn keine neue Schwingungsenergie zugeführt wird, zeitlich abklingen. Resonanzen, die man als Verallgemeinerung von Eigenlösungen ansehen kann, spielen in vielen Gebieten der Technik eine wichtige Rolle. In diesem Projekt beschäftigen wir uns mit akustischen Resonanzen, wie sie beim Start von Flugzeugen an Tragflächen auftreten, und mit sogenannten “leaky modes” von photonischen Kristallen. Die zentrale Idee ist wiederum die Polbedingungstheorie, die wir für optische Streuprobleme entwickelt haben, auf die Resonanzprobleme zu übertragen. Der wichtige Vorteil des Polbedingungsansatzes ist es, dass es damit gelingt, die Eigenwertstruktur der Resonanzprobleme zu erhalten. Das ermöglicht die Verwendung etablierter numerischer Pakete zur Eigenwertberechnung. Erste Ergebnisse aus Akustik und Optik für 2D-Probleme liegen vor.

Simulation neuartiger optischer Nanomaterialien (Sven Burger, Roland Klose, Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Kooperation: M. Wegener, DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Das DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen in Karlsruhe untersucht unter anderem optische Metamaterialien. Bei einem ersten Arbeitstreffen Ende des Jahres, wurden vier mögliche Projekte für eine zukünftige Zusammenarbeit ausgewählt. Erste Simulationen wurden bereits erfolgreich durchgeführt.

Magnetostatik – MEG Simulation (Lin Zschiedrich, Sven Burger, Roland Klose, Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Lutz Trams und Martin Burghoff, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

An der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt in der Abteilung Bioelektrizität und Biomagnetismus wird ein MEG betrieben, das es erlaubt, Magnetfelder im Gehirn darzustellen. In einem Vorprojekt wurde für ein vereinfachtes vier Schalenmodell, für das eine semianalytische Lösung über eine Reihendarstellung bekannt ist, Vergleichsrechnungen durchgeführt. Dabei stellt sich heraus, dass der von BESA verwendete Standardvorwärtslöser die Felder nur qualitativ richtig berechnet, hingegen unsere auf finiten Elementen basierten Approximationen gegen die semianalytische Lösungen konvergieren.

Photolithographie (Frank Schmidt, Sven Burger, Lin Zschiedrich; Kooperation: Reinhard März (Infineon Technologies AG, München), Helmut Zarschitzky (JCMwave GmbH, Putzbrunn), Alfons Daiderich (JCMwave GmbH, Putzbrunn), Markus Bender (Infineon Technologies AG, Dresden); Förderung: ZIB)

In Zusammenarbeit mit JCMwave wurden zu Beginn des Jahres erste Testrechnungen und Benchmarks zur Simulation photolithographischer Masken für Infineon durchgeführt. Das von uns mit JCMwave entwickelte Softwarepaket JCMharmony war dabei den Konkurrenten sowohl hinsichtlich der Rechengenauigkeit als auch der Rechengeschwindigkeit überlegen. Anfang 2005 wird nun im Auftrag von JCMwave das gemeinsame Softwarepaket angepasst und Infineon zur Verfügung gestellt.

OptecBB (Frank Schmidt, Sven Burger, Lin Zschiedrich; Kooperation: OptecBB e.V.)

Seit dem vergangenen Berichtszeitraum ist das ZIB und insbesondere die Gruppe „Computational Nano-Optics“ Mitglied des Kompetenznetzwerks OptecBB - Optische Technologien in Berlin und Brandenburg.

Optec-Berlin-Brandenburg (OpTecBB) e.V. ist eine Initiative von Firmen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin und Brandenburg, die gemeinsame Wege zur Erschließung und Nutzung der optischen Technologien gehen wollen. OpTecBB e.V. gehört zu den sieben vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten regionalen Kompetenznetzen auf dem Gebiet der optischen Technologien, die gemeinsam mit weiteren zwei Kompetenznetzen in OpecNet Deutschland e.V. zusammengeschlossen sind.

Durch Kooperation, Koordination und Bündelung wirtschaftlicher und wissenschaftlicher Aktivitäten soll ein nachhaltiger Beitrag zur Stärkung der Innovationskraft der regionalen Wirtschaft und der Technologieschwerpunkte von Berlin und Brandenburg geleistet werden.

Im Berichtszeitraum hat sich die Gruppe „Computational Nano-Optics“ auf dem jährlichen Seminar des Kompetenznetzwerks, sowie bei einem Treffen mit vergleichbaren Netzwerken in Nordamerika (Tucson und Ottawa) auf der Photonics West in San Jose, CA, präsentiert.

Schnelle Faltung (Achim Schädle; Kooperation: María López-Fernández und Cesar Palencia, Departamento de Matemática Aplicada y Computación, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spanien; Christian Lubich (Mathematisches Institut, Universität Tübingen);

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Es wurde ein schneller, vergesslicher Faltungsalgorithmus entwickelt, implementiert und mathematisch untersucht.

Diesen Algorithmus gibt es in zwei Varianten. Die erste Variante [8] erlaubt es das Ergebnis von N Schritten eines impliziten Runge-Kutta Verfahrens angewandt auf eine lineare, inhomogene parabolische Differentialgleichung bis auf eine Genauigkeit von ε mit der Lösung von nur

$$O\left(\log N \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

linearen Gleichungssystemen zu berechnen.

In der zweiten Variante [9] können N Schritte einer Faltungsquadratur zur Approximation eines Faltungsintegrals, mit nur $O(N \log N)$ Multiplikationen und einem Speicheraufwand von $O(\log N)$ berechnet werden. Hierbei werden keine Auswertungen des Faltungskerns benötigt, sondern $O(\log N)$ Auswertungen seiner Laplacetransformierten. Das Verfahren kann zur Lösung von linearen und nichtlinearen Integral- und Integrodifferentialgleichungen verwendet werden.

Publikationen

- [1] R. März, S. Burger, S. Golka, A. Forchel, C. Herrmann, C. Jamois, D. Michaelis, K. Wandel: *Planar High Index-Contrast Photonic Crystals for Telecom Applications* In: *Photonic Crystals - Advances in Design, Fabrication and Characterization*, Eds.: K. Busch et al., Wiley-VCH (2004), 308-329.
- [2] S. Burger, R. Klose, R. März, A. Schädle, F. Schmidt, L. Zschiedrich, *Efficient Finite Element Methods for the Design of Microoptical Components*, Proceedings of the MOC04 (2004), J8.
- [3] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, L. Zschiedrich, *Adaptive FEM solver for the computation of electromagnetic eigenmodes in 3D photonic crystal structures*, Proceedings of the SCEE (2004).
- [4] R. März, S. Burger, H. Heidrich, A. Forchel, C. Herrmann, R. Wehrspohn, D. Michaelis, K. Wandel, *High-contrast planar photonic crystals*, In: *Nanophotonics for Communication*, Eds. M. Lipson et al., Proc. SPIE Vol. **5597** (2004), 68-81.
- [5] L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt. *A new finite element realization of the Perfectly Matched Layer Method for Helmholtz scattering problems on polygonal domains in 2D*. Technical Report 03-44, ZIB, 2003. to appear in J. Comp. Appl. Math.
- [6] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, L. Zschiedrich, *HelmPole - A finite element solver for scattering problems on unbounded domains: Implementation based on PML*, Report 03-38, ZIB, 2003.
- [7] F. Schmidt *Pole Condition: A new Approach to solve Scattering Problems* Oberwolfach Report, Vol. 1, 615-617, (2004).
- [8] M. López-Fernández, Ch. Lubich, C. Palencia, A. Schädle *Fast Runge-Kutta approximation of inhomogeneous parabolic equations*, Report 05-10, ZIB, 2005

- [9] A. Schädle, M. López-Fernández, Ch. Lubich *Fast and oblivious convolution quadrature*, Report 05-09, ZIB, 2005

2.2.3 Medizinische Therapie- und Operationsplanung

Das Gebiet der computerunterstützten Therapie- und Operationsplanung bildet mittlerweile einen fest etablierten Schwerpunkt unserer Tätigkeit. Dabei werden neue medizinische Fragestellungen daraufhin untersucht, ob und wie sie sich mittels Computereinsatz verbessert durchführen lassen. Auf dem Weg zu klinisch einsetzbaren Systemen wurden viele Anwendungsaspekte bearbeitet und im engen Wechselspiel mit den grundlagenorientierteren Projekten der Schwerpunkte “Medizinische Bild- und Geometrieverarbeitung” und “Nichtlineare Optimierung und Steuerung” Detailverbesserungen vorgenommen. Neue Projekte wurden in den Gebieten Neurochirurgie, chirurgische Onkologie, chirurgische Orthopädie, Kardiologie, Rhinochirurgie und Dental-Implantologie gestartet.

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

Bearbeitet von: Stefan Zachow, Bodo Erdmann, Martin Weiser, Britta Weber, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Hans-Florian Zeilhofer, Robert Sader, (Kantonsspital Basel, Klinik für Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie, Schweiz und 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)

Auf dem Gebiet der 3D Operationsplanung in der MKG-Chirurgie hat das ZIB im Verlauf der letzten Jahre eine international anerkannte Expertise erworben. Mittlerweile wurden über 30 Planungen für Patienten mit Kiefer- und Schädeldefektbildungen mit steigender Komplexität durchgeführt. Insbesondere mit Dr. Anders Westermarck aus Stockholm erfolgten Operationsplanungen zur chirurgischen Korrektur von gravierenden Fehlentwicklungen des Gesichtsschädels und des Unterkiefers [27, 29]. Die am ZIB entwickelten Verfahren zur computergestützten 3D Modellplanung haben sich dabei bewährt und die Anforderungen an die Planungsmodelle hinsichtlich der geometrischen Diskretisierung und der Gitterqualität sind weitgehend geklärt [28]. Die Planung zur funktionellen Wiederherstellung der Neutralverzahnung durch Osteotomie und Repositionierung mobilisierter Kiefersegmente ist sehr präzise durchführbar [20]. Auch die gezielte Anlagerung von Knochenmaterial zum Aufbau von unterentwickelten Knochenstrukturen kann im Rahmen der Planung berücksichtigt werden. Im nächsten konsequenten Schritt gilt es, zusammen mit klinischen Partnern die exakte Umsetzung einer solchen Planung durch den Einsatz von intraoperativen Navigationstechniken zu realisieren [26].

Die mathematisch-physikalische Modellierung der Weichgewebedeformation stellt in diesem Projekt immer noch ein wichtiges Forschungsthema dar. Der ursprüngliche linear-elastische Modellierungsansatz erwies sich in Kombination mit den Planungsmodellen als gute Grundlage für die *qualitative* Bewertung der aus der Knochenumstellung resultierenden Gesichtsform [17]. Im Berichtszeitraum lag ein wesentlicher Schwerpunkt der Untersuchungen auf der *quan-*



ABBILDUNG 2.8: Links: Patienten mit ausgeprägter Mittelgesichtsrücklage. Mitte: Prä- und postoperative CT-Daten. Rechts: Patienten nach Oberkieferverlagerung.

tativen Überprüfung der Simulationsgenauigkeit. Dazu wurden für vier Patienten mit ausgeprägter Mittelgesichtsrücklage Planungen durchgeführt, bei denen aufgrund der besonderen Technik der Distraktionsosteogenese mittels eines externen, Halobogen-fixierten Distraktors [18, 19] postoperative Kontroll-CTs angefertigt wurden (siehe Abbildung 2.8). Anhand dieser Daten lassen sich die tatsächlich erfolgte Knochenverlagerung und die daraus resultierende Weichgewebeanordnung rekonstruieren. Die mittlere Abweichung im planungsrelevanten Gesichtsbereich lag nach exakter Nachbildung der Knochenverlagerung und Weichgewebesimulation in allen Fällen zwischen 1 und 1,5 mm [15, 16].

Zur Bestimmung des bestmöglichen Modellierungsansatzes erfolgten weitere Simulationen auf Basis eines *homogenen* und eines *inhomogenen* Gewebemodells mit variierenden histomechanischen Parametern, wobei die Abweichungen zwischen allen Simulationsergebnissen

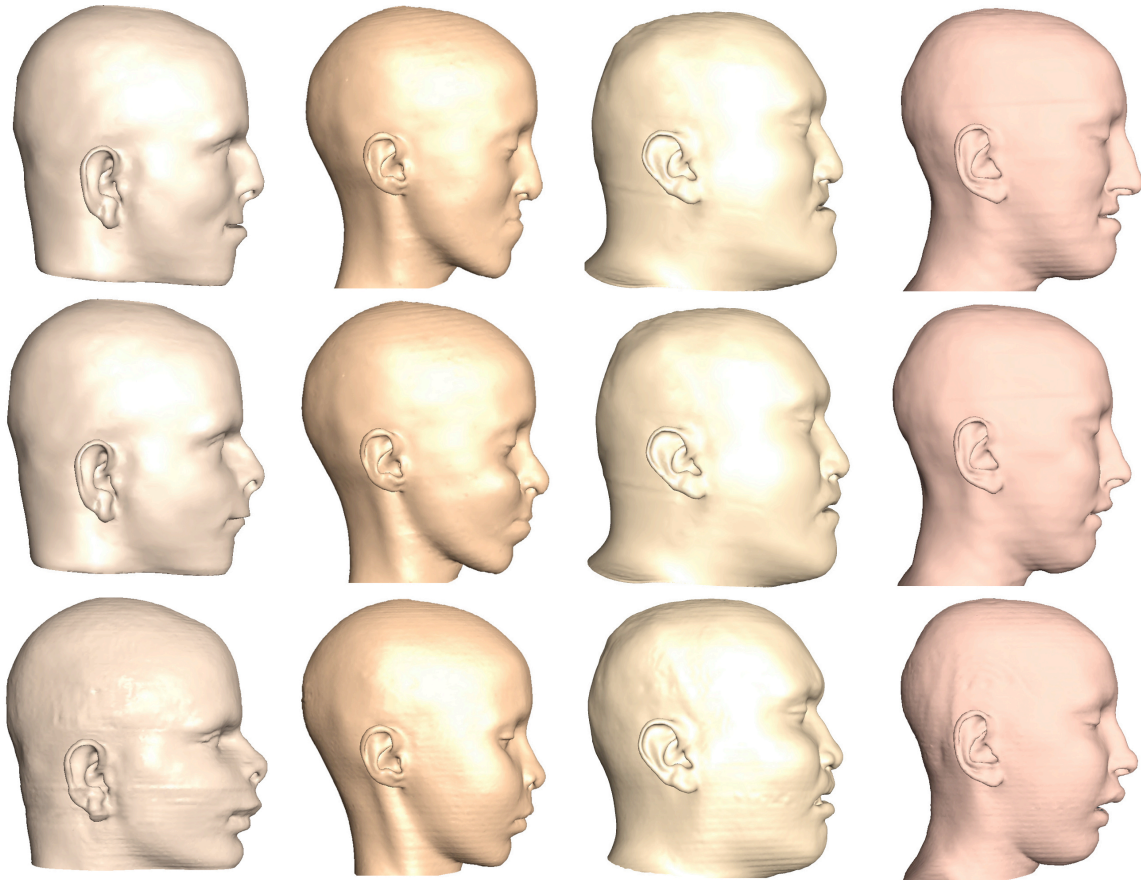


ABBILDUNG 2.9: Oben: Aus den präoperativen CT-Daten rekonstruiertes Gesicht. Mitte: Simulierte Gesichtsform nach Mittelgesichtsvorverlagerung. Unten: Aus den postoperativen CT-Daten rekonstruiertes Gesicht

(Abbildung 2.9, Mitte) und der realen Weichgewebeanordnung (Abbildung 2.9, unten) zur Bestimmung geeigneter Materialparameter quantitativ ausgewertet wurden [25, 31]. Des Weiteren wurden die Simulationsergebnisse eines *geometrisch linearen* Modells mit denen eines *nichtlinearen* Modells verglichen und der Einfluss lokal adaptiver Gitterverfeinerung auf das Gesamtergebnis untersucht. Aus diesen Untersuchungen ergab sich, dass zur signifikanten Verbesserung der Weichgewebepräädiktion im Wesentlichen das lokale Abheben der Weichgewebebedecke vom Knochen und dessen Verschieblichkeit über dem Knochen berücksichtigt werden müssen. Dies macht eine Behandlung von Kontaktproblemen und eine Modellierung der speziellen Randbedingungen mit problemangepassten Freiheitsgraden notwendig.

Heterogene muskuloskelettale Modellierung und Simulation der Tibia

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Rainald Ehrig

Kooperationspartner: Georg Duda, Norbert Haas, Markus Heller, Bill Taylor, (Charité Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin), Georg Bergmann (UKBF, FU Berlin)

Förderung: Klinische Forschergruppe KFO 102, Biomechanik und Biologie der Knochen-

heilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese, DFG

Die computergestützte Planung und Simulation von Eingriffen an der unteren Extremität benötigt exakte patientenspezifische Daten über Lage und Bewegungsmuster von Gelenken. Die Analyse der Verfahren, solche Informationen aus Markerdaten zu gewinnen, wurde 2004 abgeschlossen [21, 22, 23].

Ebenfalls zur Publikation gelangten die Ergebnisse der inversen Dynamik am Schafsmodell [24]. Dadurch stehen einerseits umfangreiche Daten zur Gelenkkinematik an Hüft-, Knie-, oberem und unterem Sprunggelenk für weitergehende Untersuchungen zur Verfügung. Andererseits ist ein Vergleich mit in vivo gemessenen Hüftkontaktkräften möglich. Hierdurch konnte gezeigt werden, dass unser Modell tatsächlich die muskuloskelettalen Bedingungen im Hinterlauf des Schafs bestimmen kann.

Auch die methodischen Untersuchungen zur Bestimmung von Gelenkpositionen sind abgeschlossen. Hierbei ließen sich eindeutige Richtlinien erarbeiten, die auch unter ungünstigen Verhältnissen optimale Approximationen für die Lage von Gelenken bzw. Gelenkachsen ermöglichen. Derzeit werden diese Ergebnisse an umfangreichen Human-Daten verifiziert.

Aktuelle Arbeitsschwerpunkte sind die Implementierung der Mehrkörpersimulation unter Berücksichtigung realistischer Gelenkkinematik und muskulärer Erregungsmuster und die Visualisierung einer patientenspezifischen Vorwärtsdynamik mit Amira.

Simulation des menschlichen Gangs

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Susanne Ertel

Kooperationspartner: Ralf Kornhuber, FU Berlin, Rolf Krause, Universität Bonn, Uli Sack, FU Berlin, Oliver Sander, FU Berlin

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A2

Die physikalischen Vorgänge in Knie und Hüfte während des Gehens werden durch ein zeitabhängiges Kontaktmodell linear elastischer Körper beschrieben. Die Schwierigkeit seiner numerischen Behandlung liegt in der Nichtlinearität der Ungleichungsnebenbedingungen am Kontaktrand.

Die Zeit–Ort–Diskretisierung der Newtonschen Bewegungsgleichung erfolgt nach der Methode von Rothe. Zur Lösung des innen liegenden Kontaktproblems im Ort wurde an der FU Berlin ein monotoner Mehrgitterlöser basierend auf einem nichtlinearen Gauß–Seidel–Verfahren entwickelt. Dessen Effizienz lässt insbesondere auch die Anwendung impliziter Verfahren zur Zeitdiskretisierung zu und somit die Konstruktion neuer Verfahrensklassen für Kontaktmodelle.

Zum Test geeigneter Zeitintegratoren diente das Hertzsche Kontaktproblem in zwei Dimensionen. Newmark-Verfahren, Alpha-Verfahren und symplektische Verfahren wurden sowohl hinsichtlich der Qualität der Berechnung von auftretenden Verschiebungen und Spannungen, als auch gemäß dem Erhalt der Systemenergie beurteilt.

Ist die Zeitschrittweite klein in Relation zur Gitterweite der Ortsdiskretisierung, so zeigt eine Straight–Forward–Implementierung jedes untersuchten Verfahrens Oszillationen im Wechsel von Kontakt–/ Nichtkontakt–Zustand der Randknoten. Erste Besserung bringt die Regularisierung des zu den Kontaktbedingungen gehörigen charakteristischen Funktionals, wobei nun eine geringfügige Durchdringung der Körper zugelassen ist. Zur Entwicklung eines stabilen Zeitintegrators besteht hier jedoch Bedarf an weiterer Forschungsarbeit.

Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

Therapieplanung in der Neurochirurgie (Hans Lamecker, Stefan Zachow, Britta Weber, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard; Kooperation: Ernst-Johannes Habert, Maja Zöckler (Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin); Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2)

Ziel dieses Projekts ist die computergestützte Planung operativer Korrekturen frühkindlicher Schädelneurogenesen aufgrund vorzeitig verknöchernder Schädelnähte (Kraniosynostosen). Um objektive Planungskriterien für eine Schädelumformung durch den Chirurgen zu schaffen, wurde eine Analyse statistischer Schädelformvarianten gesunder Kinder im ersten Lebensjahr durchgeführt [2]. Hierzu wurde zunächst der für die Operation relevante Bereich des Schädels durch wenige anatomische Landmarken festgelegt und in Regionen unterteilt (vgl. Abbildung 2.10). Die Stichprobe für die statistische Analyse basiert zur Zeit auf 21 aus MRT Daten rekonstruierten Oberflächenmodellen, die mittels eines am ZIB entwickelten Matchingverfahrens (siehe S. 74) aufeinander abgebildet wurden. Daraufhin konnten Mittelwerte und Hauptmoden der Variabilität berechnet werden [11]. Das Verfahren kann nun zur Beantwortung klinisch relevanter Fragestellungen eingesetzt werden. Dazu muss im nächsten Schritt die Stichprobe vergrößert werden.

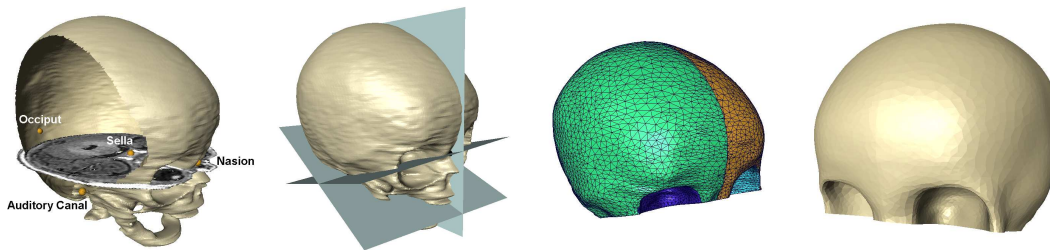


ABBILDUNG 2.10: Bestimmung des relevanten Schädelbereiches mittels anatomischer Landmarken: Nasion, Gehörgänge, Sella und Okziput legen Ebenen fest, an denen die Oberflächen geschnitten werden. Auf Basis von vier Regionen wird die statistische Analyse durchgeführt: rechts das Ergebnis der Mittelung von 21 Schädelformen.

Onkologische Leberchirurgieplanung (Hans Lamecker, Thomas Wenckebach, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard; Kooperation: Thomas Lange, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2)

Die Resektion von Tumoren in der Leber ist selbst für erfahrene Chirurgen ein schwieriger und riskanter chirurgischer Eingriff. Aufgabe einer computergestützten präoperativen Planung ist es, die genaue Form und Lage des Tumors innerhalb der Leber und relativ zu den umgebenden Gefäßen zu bestimmen. Die Ergebnisse der Planung sollen dann dem Chirurgen während der Operation unterstützend zur Verfügung stehen.

In der Planungsphase müssen möglichst genaue Modelle der Gefäße in der Leber erzeugt werden. Die Gefäße werden durch kontrastmittelgestützte CT- oder MRT-Verfahren abgebildet. Um alle Gefäße zu erfassen, werden Aufnahmen zu verschiedenen Phasen der Kontrastmittelpropagation gemacht, welche schließlich zu einem einzigen Modell fusioniert werden müssen. Die durch die Atembewegung des Patienten entstehende Leberdeformation muss dabei kom-

pensiert werden. Dazu hat das ZIB gemeinsam mit der Robert-Rössle-Klinik ein Verfahren entwickelt, das nichtlineare Registrierungsverfahren mit Verfahren zum Inhomogenitätsausgleich von MRT-Daten und Maskierungsstrategien kombiniert (siehe S. 53) [12, 13]. Eine Validierung auf Basis von 5 CT- und MRT-Daten von verschiedenen Patienten zeigt, dass die auftretenden Deformationen mit diesem Verfahren gut erfasst werden und somit exakte Gefäßmodelle erzeugt werden können.

Die Übertragung der Planungsergebnisse (siehe Abbildung 2.11) in die intraoperative Situation erfolgt über die Registrierung des Lebermodells mit 3D Ultraschalldaten. Mittels eines optischen Trackingsystems kann der Chirurg so fortwährend seine Instrumente in Relation zu den Planungsergebnissen setzen. Dabei besteht die Herausforderung in einer schnellen Registrierung der Planungsmodelle mit den Ultraschalldaten. In Kooperation mit der Robert-Rössle-Klinik wurde ein Hybridverfahren aus dem ICP-Algorithmus und B-Spline basierter nichtlinearer Registrierung der Gefäßmittellinien entwickelt. Erste Experimente mit verschiedenen Patientendaten zeigen vielversprechende Ergebnisse [14].

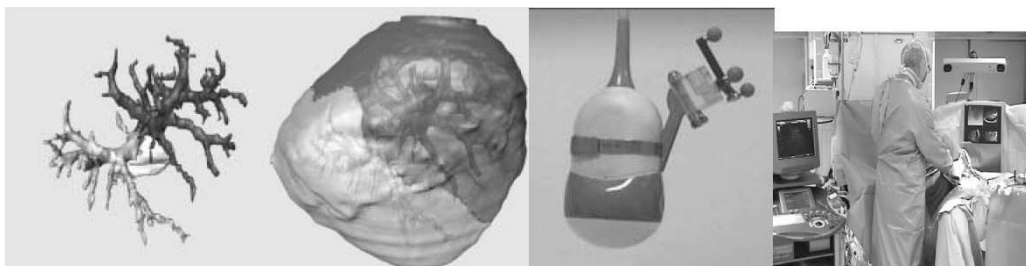


ABBILDUNG 2.11: (Von links nach rechts) Ergebnis der Planung: (1) hellgraue Gefäße werden entfernt, (2) Resektionsgebiete der Leber. Intraoperative Situation: (3) vom Trackingsystem verfolgter Ultraschallkopf, (4) Navigationssystem mit Amira-Bildschirm, das die Planungsergebnisse mit den Ultraschalldaten überblendet anzeigt.

Integrierte Softwareumgebung für die computergestützte 3D-Operationsplanung bei muskuloskelettalen Erkrankungen (Detlev Stalling, Hans-Christian Hege; Kooperation: Olaf Etzmuß, Mercury Computer Systems GmbH; Markus Heller, Georg Duda, Norbert P. Haas, Charité, Campus Virchow-Klinikum, HU; Förderung: Europäischer Fonds für regionale Entwicklung (EFRE))

Für den Erfolg komplexer orthopädischer Behandlungen ist eine präoperative Planung des Eingriffs anhand von Bilddaten oft entscheidend. Im Rahmen dieses Projektes wird ein Operationsplanungssystem entwickelt, das zunächst für Hüftersatzoperationen eingesetzt werden soll.

Im ersten Schritt soll ein neues Verfahren entwickelt werden, das es erlaubt, für Teile des menschlichen Skeletts eine 3D-Geometrierekonstruktion durchzuführen. Diese erfolgt nicht aus 3D-Bilddaten, sondern aus (wenigen) planaren Röntgenbildern und unter Nutzung von statistischen Formmodellen. Hierzu wurde ein Verfahren für die schnelle Erzeugung synthetischer Röntgenbilder entwickelt sowie eine Software-Architektur zur nichtlinearen Optimierung entworfen. Erste Tests waren vielversprechend und zeigten, dass das Verfahren im Prinzip funktioniert.

Planung von Nasennebenhöhlen- und Nasenscheidewandoperationen unter Berücksichtigung der individuellen Nasenatmung (Stefan Zachow, Hans-Christian Hege; Kooperation: Thomas Hildebrandt, Asklepios Klinik Birkenwerder; Peter Bartsch, CFX Berlin Software GmbH)

Die Nase mit ihren Nebenhöhlen und den Siebbeinzellen ist eine außerordentlich komplexe anatomische Region. Die Rekonstruktion aus tomografischen Daten erfordert eine besonders hohe räumliche Auflösung. Verfügt man über detaillierte Modelle der Nasenanatomie, dann lassen sich daran Simulationen der Luftströmung für die individuelle Nasenatmung durchführen. Solche Simulationen ermöglichen zum einen der Pharmaindustrie, geeignete Formen der Medikamentverabreichung zu entwickeln, zum anderen können sie der Operationsplanung dienen, um bei einer gestörten Nasenatmung die optimale rhinochirurgische Korrektur zu bestimmen. Zur Bearbeitung dieses Projektes wurden Kontakte zum Unfallkrankenhaus Berlin und zur Charité aufgenommen, um extrem hochaufgelöste CT-Datensätze der Nasenregion zu erhalten (siehe Abbildung 2.12 links). Aus diesen Daten wurde der primäre Atmungstrakt der Nase mit allen Nebenhöhlen rekonstruiert (siehe Abbildung 2.12 Mitte).

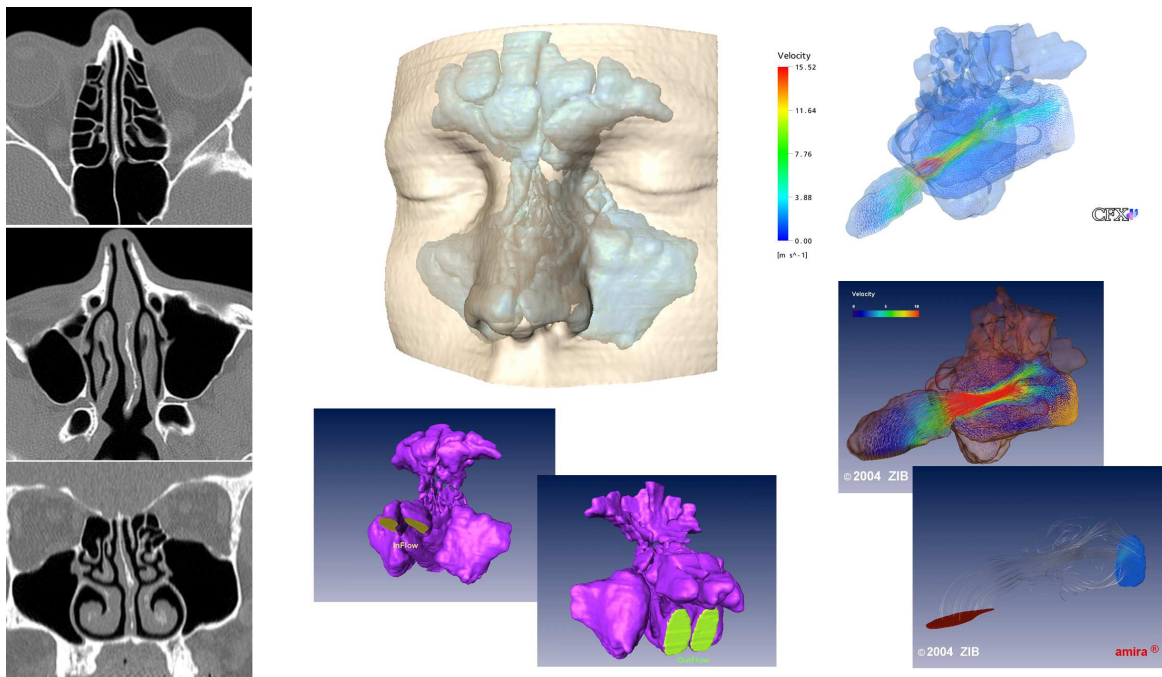


ABBILDUNG 2.12: Links: CT der Nasennebenhöhlen. Mitte: 3D Rekonstruktion des Atmungstraktes. Rechts: Ergebnisse der Strömungssimulation.

Die Simulation der Strömungsmechanik (Druck, Strömungsgeschwindigkeit und Turbulenzen) erfolgte nach Vorbereitung FE-tauglicher Gitter des Atmungstraktes exemplarisch bei der Firma CFX. Aus der Strömungsanalyse (siehe Abbildung 2.12 rechts) sollen in Kombination mit rhinomanometrischen Messungen am Patienten Erkenntnisse gewonnen werden, die im Rahmen der Planung eines chirurgischen Eingriffs genutzt werden können. Vorstellbar ist dabei die Simulation der Strömungsverhältnisse bei Begradigung oder gezielter Perforation der Nasenscheidewand oder auch der Resektion von Polypen oder der gezielten Verödung von gestörten Arealen mit dem Ziel der verbesserten Nasenatmung. Erste Gespräche erfolgten mit der HNO-Klinik der Universität Leipzig mit dem Ziel einer Kooperation mit dem dort neu gegründeten Innovationszentrum für computergestützte Chirurgie (iccas).

Adaptive FEM-Simulation des menschlichen Unterkiefers unter besonderer Berücksichtigung von Anisotropie und Inhomogenität des Knochens (Bodo Erdmann; Kooperation: Cornelia Kober (Fachhochschule Osnabrück, Hightech-Forschungs-Zentrum TU München), Christian Hellmich (Technische Universität Wien), Jens Lang (Technische Universität Darmstadt), Robert Sader (Universität Frankfurt, Hightech-Forschungs-Zentrum TU München), Hans-Florian Zeilhofer (Kantonsspital Basel/Universitätskliniken, Hightech-Forschungs-Zentrum TU München))

Die bereits im Jahr 2003 begonnene schrittweise Heranführung an die anatomische Realität des menschlichen Unterkiefers wurde 2004 fortgesetzt. So wurde die Modellierung der Kaumuskulatur verfeinert und die Sensitivität der Materialeigenschaften der vereinfachten Gelenkkapseln einer detaillierten Analyse unterzogen [5, 6, 8].

Besonderer Schwerpunkt war die Erweiterung der Simulation auf ein anisotropes und inhomogenes Materialgesetz für den Unterkieferknochen, vgl. Abbildung 2.13. Die Umsetzung der Grauwerte aus dem CT in inhomogene Materialparameter der Elastizität ist Gegenstand der Kooperation mit C. Hellmich. Die Basis bildet hier eine mikromechanische Materialmodellierung, bei der der Knochen auf wenige elementare Bestandteile zurückgeführt wird, die für alle knöchernen Organe/Substanzen gleich sind. Eine Sensitivitätsanalyse zeigt eine Minimierung der Volumendehnung für den physiologischen, anisotropen Fall im Vergleich zu den vereinfachten isotropen Simulationen. Dies deutet in gewisser Weise auf ein "optimales Design" der Materialverteilung des Unterkiefers in Bezug auf die einwirkenden Belastungen hin. Interessant ist insbesondere die ausgezeichnete Rolle der Volumendehnung, die Gegenstand weiterer Forschung ist. Zudem konnte mit Einführung von Anisotropie und insbesondere auch der Inhomogenität die qualitative Vergleichbarkeit des Profils der Volumendehnung mit dem Dichteprofil aus den CT-Daten weiter verbessert werden, [7, 4]. In Kooperation mit J. Lang wurde eine Verbindung von adaptiver numerischer Simulation und Anisotropie des Materialgesetzes geschaffen.

Planung von Zahnimplantaten und Kieferrekonstruktionen auf Basis eines statistischen 3D Unterkiefermodells (Stefan Zachow, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Kooperation: Barbara Elsholtz, Michael Stiller, Zentrum für Zahn-, Mund- und Kieferheilkunde, Universitätsklinikum Charité Berlin, Campus Benjamin Franklin)

Die Stabilität eines knochenverankerten Zahnersatzes hängt in starkem Maße vom verfügbaren Knochenangebot und der optimalen Positionierung der Implantate im Kiefer ab. Die Einbringung solcher Implantate in den Unterkiefer birgt aufgrund der Lage des mandibulären Nerves stets ein gewisses Risiko. Geeignete Implantatpositionen und die mögliche Bohrtiefe werden daher anhand von Panorama-Röntgenaufnahmen (OPTG) oder auch an computer-tomografischen Aufnahmen (CT) individuell bestimmt. Die Verlässlichkeit der OPTGs im Hinblick auf die Bewertung der Nervlage ist aufgrund der fehlenden Tiefeninformation jedoch fragwürdig. Intention des Projektes ist es, aus einer repräsentativen Stichprobe von speziellen CT-Aufnahmen die Geometrie des Unterkiefers und die Lage der Nerven dreidimensional zu erfassen und ein statistisches Formmodell zu erstellen, mit dem überprüft werden kann, ob die Lage der Nerven mit der Unterkieferform korreliert.

Die Verfügbarkeit eines dreidimensionalen statistischen Formmodells des menschlichen Unterkiefers stellt ebenfalls eine nützliche Grundlage für die Operationsplanung in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie dar (siehe S. 39). Bei fehlgebildeten oder durch Tu-

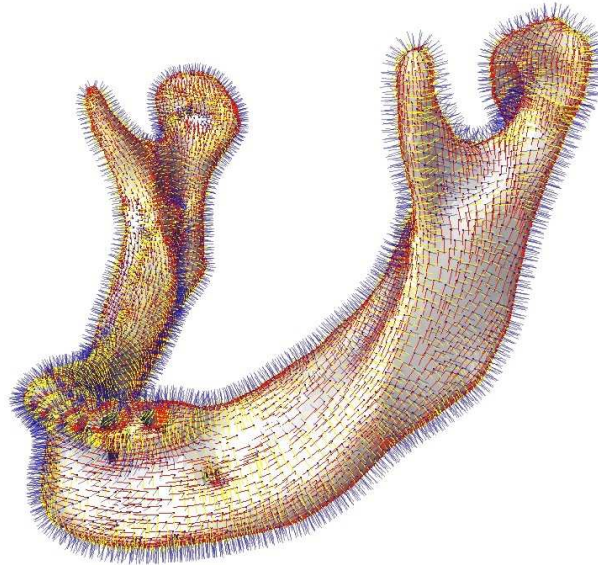


ABBILDUNG 2.13: Axiale, radiale und circumferentiale Trajektorien der anisotropen Elastizität des Unterkieferknochens.

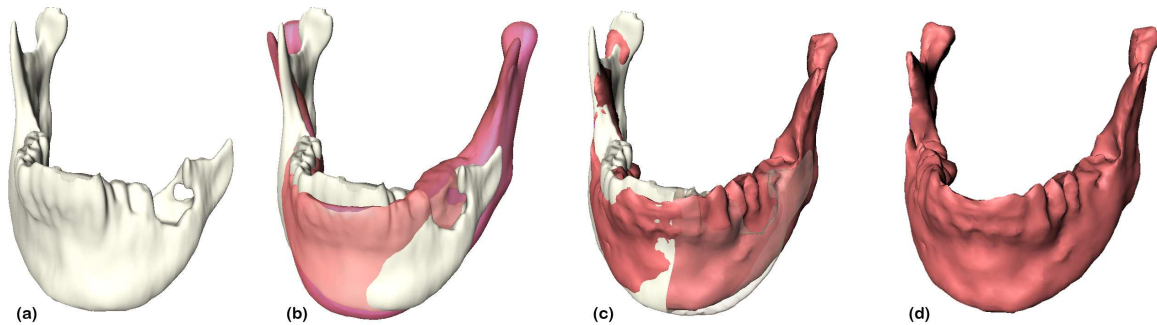


ABBILDUNG 2.14: Rekonstruktion eines fehlentwickelten Unterkiefers (a), b) mittleres Unterkiefermodell, c) angepasst an die rechte Unterkieferhälfte, d) 3D Rekonstruktionsgrundlage

morresektion verlorenen Knochenstrukturen kann das Formmodell, welches eine gemittelte Normalausprägung des menschlichen Unterkiefers mit seinen in der Stichprobe auftretenden Variationen repräsentiert, an die noch vorhandenen Knochenstrukturen angepasst werden und so als individuelle Rekonstruktionsgrundlage dienen [30].

Parameteridentifizierung in der Hyperthermie (Martin Weiser, Tobias Gänzler; Kooperation: S. Volkwein, Karl-Franzens-Universität Graz; P. Wust, J. Gellermann, Charité; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1, DFG-Einzelprojekt „Adaptive Regelung der Hybrid-Hyperthermie“)

In der regionalen Hyperthermie dominiert die Perfusion (Durchblutung) die sich einstellende Gewebetemperatur. Die Perfusion ist jedoch in hohem Maße individuell unterschiedlich, variiert erheblich zwischen Therapiesitzungen und hängt zudem von der sich im Körper einstellenden Temperaturverteilung ab. Die Planungsunsicherheit bei der Verwendung einfacher Standardmodelle ist daher erheblich. Mit dem an der Charité zur Verfügung stehenden, kombinierten, offenen MR-Hyperthermie-Applikator kann ein Signal gemessen werden, das mit Temperatur und Perfusion korreliert.

Im Berichtszeitraum wurden die schon im Vorjahr begonnenen Entwicklungen zur Identifizierung von Perfusion und Temperatur aus diesem Messsignal fortgeführt. Insbesondere wurde ein SQP-Verfahren im Finite-Elemente-Code KASKADE implementiert, das auf realen Geometrien und Messdaten arbeitet [1]. Bei der notwendigen Regularisierung kann die besondere Struktur der Perfusion ausgenutzt werden, die innerhalb eines jeden Gewebes als stetig differenzierbar vorausgesetzt werden kann.

Mehrskalmodellierung des Wärmetransports im Gefäßsystem (Peter Deuffhard, Martin Weiser, Susanne Ertel, Susanne Gerber, Andre Massing; Kooperation: Reinhard Hochmuth; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1)

Nachdem in den vorherigen Jahren die kleinste Skala des Mehrskalmodells des Wärmetransports durch das menschliche Gefäßsystem durch analytische Homogenisierung behandelt wurde, stand im Berichtszeitraum die Modellierung mittelgroßer Adern im Vordergrund. Dabei werden die Adern nur als eindimensionale Pfade aufgefasst, so dass die Wärmekonvektion auf eine gewöhnliche Differentialgleichung führt. Der Wärmeaustausch mit dem umliegenden Gewebe wird durch einen Wärmeübergangskoeffizienten (Nusselt-Zahl) beschrieben, der aus kleinskaligen Modellrechnungen geschätzt werden kann. Im Rahmen eines Projektseminars wurden erste Modellrechnungen zur Abschätzung der Nusselt-Zahl durchgeführt. Dabei ergab sich eine nur schwache Abhängigkeit des Wertes vom Gewebetyp, von der Temperaturdifferenz und der Fließgeschwindigkeit des Blutes, so dass eine Modellierung mit konstanter Nusselt-Zahl gerechtfertigt erscheint.

Zeit- und ortsadaptive FEM-Simulation des elektrischen Verhaltens von Herzmuskelgewebe (Bodo Erdmann, Peter Deuffhard; Kooperation: Luca Pavarino, Universität Mailand, Italien; Piero Colli Franzone, Universität Pavia, Italien; Jens Lang, Technische Universität Darmstadt)

Die elektrische Aktivität im Herzmuskel kann durch ein System von degenerierten parabolischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen in drei Raumdimensionen modelliert werden, welche das intra- und das extrazelluläre Potenzial des myokardialen Gewebes beschreiben. Das Modell schließt intramurale Faserrotation und anisotrope Leitfähigkeitskoeffizienten ein. Die zwei Gleichungen für die Potentiale sind mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen gekoppelt, welche die Ionenströme in den Zellmembranen modellieren. Die Potentiale verhalten sich in den Phasen *Anregung*, *Plateau* und *Erholung* im zeitlichen und örtlichen Verlauf in Gewebemodellen von realistischer Größe stark unterschiedlich. Die Lösungsmethode der

Kooperationspartner beinhaltet eine einfachere Steuerung der Zeitschrittweite und eine Parallelisierung der Ortsprobleme durch Gebietszerlegungsmethoden in jedem Zeitschritt.

Im Berichtszeitraum konnten mit der am ZIB entwickelten Software KARDOS erste Rechnungen durchgeführt werden (vgl. Abbildung 2.15). Der auf einer Rothe-Methode basierende Diskretisierungsansatz erlaubt eine adaptive Steuerung der Zeitschrittweite und der Feinheit des räumlichen Gitters. Weitere Arbeiten sollen die Effizienz beider Methoden vergleichen.

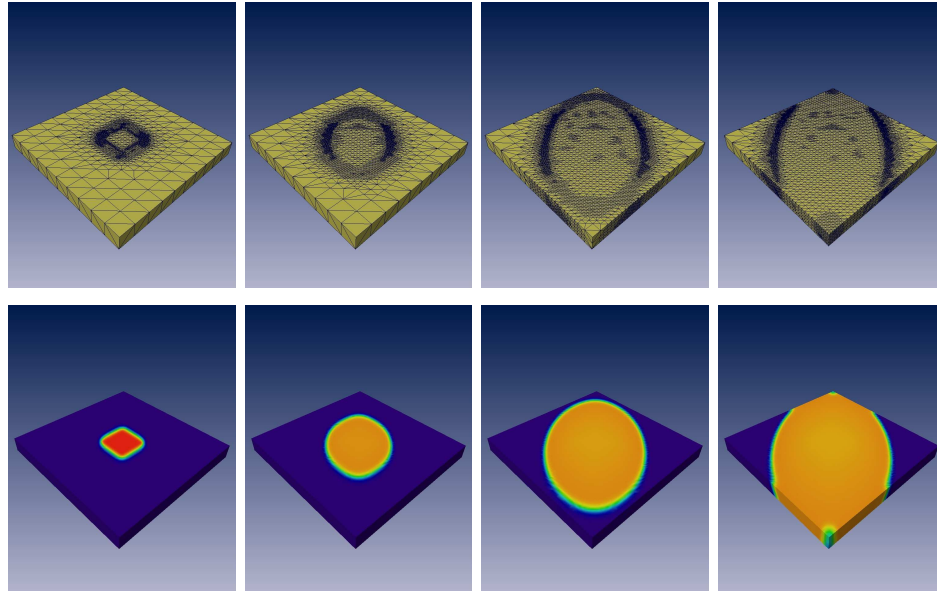


ABBILDUNG 2.15: Zeitliche Entwicklung des Potentials (unten) und des adaptiven Gitters (oben) in der kardio-elektrischen Anregungsphase.

Publikationen

- [1] T. Gänzler, S. Volkwein, M. Weiser, *SQP methods for parameter identification problem arising in hyperthermia*, eingereicht bei Optimization Methods and Software
- [2] H. Haberl, B. Hell, M. Zöckler, S. Zachow, H. Lamecker, A. Sarrafzadeh, B. Riecke, W.R. Lanksch, P. Deuffhard, J. Bier, M. Brock, *Technical Aspects and Results of Surgery for Craniosynostosis*, Zentralblatt für Neurochirurgie. 2004, May 65(2), pp. 65-74.
- [3] J.-P. Kassi, W.R. Taylor, J. Schwarzkopf, H. Schell, G.N. Duda, R. Ehrig, *Wie sind Osteosynthesesysteme und Defektzonen in vivo belastet?*, 68. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Unfallchirurgie in Verbindung mit dem Deutschen Orthopädenkongreß, Berlin, Oktober 2004.
- [4] C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *An Application of Adaptive Finite Element Techniques in Biomechanics: Simulation of the Human Mandible*, Proc. 22. CAD-FEM Users Meeting 2004 - Internationale FEM Technologietage, Nov. 10–12, Dresden, Germany.

- [5] C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *The Influence of the Masticatory Muscles on the Structural Behaviour of the Human Mandible*, eingereicht bei Proc. 11th Workshop, "The Finite Element Method in Biomedical Engineering, Biomechanics and Related Fields", Univ. of Ulm, July 2004.
- [6] C. Kober, B. Erdmann, J. Lang, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Sensitivity of the Temporomandibular Joint Capsule for the Structural Behaviour of the Human Mandible*, in Proc. BMT2004, Ilmenau, Deutschland, Biomedizinische Technik 49 (2004) Ergänzungsband 2, 372–373.
- [7] C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Anisotropic Simulation of the Human Mandible*, Proc. EM2004, June 13–16, 2004, Univ. of Delaware, Newark, USA (invited).
- [8] C. Kober, B. Erdmann, J. Lang, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Adaptive Finite Element Simulation of the Human Mandible Using a New Physiological Model of the Masticatory Muscles*, PAMM 4, 332–333, 2004.
- [9] H. Lamecker, M. Seebass, H.-C. Hege, P. Deuffhard, *A 3D Statistical Shape Model of the Pelvic Bone For Segmentation*, Proceedings of SPIE - Volume 5370 Medical Imaging 2004: Image Processing (J.M. Fitzpatrick, M. Sonka, eds.), May 2004 pp. 1341-1351.
- [10] M. Seebass, H. Lamecker, J. Gellermann, P. Wust, *The Impact of Segmentation Accuracy on Treatment Planning for Regional Hyperthermia*, International Congress on Hyperthermic Oncology (St. Louis, Missouri), 2004.
- [11] H. Lamecker, M. Zöckler, H. Haberl, S. Zachow, H.-C. Hege, *Statistical Shape Modeling for Craniosynostosis Planning*, Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction (Banff, Canada), Abstract 27, p. 60, 2005.
- [12] T. Lange, T. Wenckebach, H. Lamecker, M. Seebass, M. Hünnerbein, *Registration of Different Phases of Contrast-Enhanced MR Data for Liver Surgery*, 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer-Roboterassistierte Chirurgie CURAC, 2004.
- [13] T. Lange, T. Wenckebach, H. Lamecker, M. Seebass, M. Hünnerbein, S. Eulenstein, P.-M. Schlag, *Registration of Portal and Hepatic Venous Phase of MR/CT data for Computer-Assisted Liver Surgery Planning*, Proceedings CARS 2005, accepted for publication.
- [14] T. Lange, S. Eulenstein, M. Hünnerbein, H. Lamecker, P.-M. Schlag, *Augmenting Intraoperative 3D Ultrasound with Preoperative Models for Navigation in Liver Surgery*, Proceedings MICCAI (C. Barillot, D.R. Haynor, P. Hellier, eds.), Lecture Notes in Computer Science 3217, Springer, 2004, pp. 534-541.
- [15] S. Zachow, Th. Hierl, B. Erdmann. *Über die Qualität einer 3D Weichgewebepräädiktion in der Gesichtschirurgie: Ein quantitativer Vergleich mit postoperativen CT-Daten. Bildverarbeitung für die Medizin*, Springer-Verlag, S. 75–79, 2004.
- [16] S. Zachow, Th. Hierl, B. Erdmann. *Predictability of tissue changes after osteotomy planning in maxillofacial surgery: A comparison with postoperative results*. In H. U. Lemke, et al., editors, *Computer Assisted Radiology and Surgery*, Elsevier Science B.V., S. 648–653, 2004.

- [17] E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, H.-C. Hege. Anatomy- and physics-based facial animation for craniofacial surgery simulations. *Medical & Biological Engineering & Computing*, 42(2):167–170, 2004.
- [18] Th. Hierl, S. Zachow, G. Wollny, G. Berti, J. Fingberg. Concepts of computer-based simulation in orthognathic surgery. *Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery*, 32(suppl 1):81–82, 2004.
- [19] Th. Hierl, S. Zachow, G. Wollny, G. Berti, J.-G. Schmidt, J. Fingberg. Computer-based simulation in distraction osteogenesis. In *Proc. of 3rd Int. Oxford Distraction Symposium of the Craniofacial Skeleton*, S. 33–34, 2004.
- [20] E. Nkenke, S. Zachow, M. Benz, T. Maier, K. Veit, M. Kramer, St. Benz, G. Häusler, F. W. Neukam, M. Lell. Fusion of computed tomography data and optical 3D images of the dentition for streak artefact correction in the simulation of orthognathic surgery. *Journal of Dento-maxillofacial Radiology*, 33(4):226–232, 2004.
- [21] W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, P. Klein, G.N. Duda, *On the Influence of Soft Tissue Coverage in the Determination of Bone Kinematics using Bone Markers*, Journal of Orthopedic Research, im Druck.
- [22] W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, G.N. Duda, *Can Skin Markers Allow the Kinematics of Underlying Bones to be Determined?*, Conf. of the European Society of Biomechanics, Eindhoven, Holland, Juli 2004.
- [23] W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, G.N. Duda, *Can Skin Markers Determine the Kinematics of Underlying Bones?*, Orthopaedic research society, Transactions Vol. 29, San Francisco, 2004.
- [24] W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, P. Seebeck, G.N. Duda, *Tibio-femoral Joint Contact Forces in Sheep*. Journal of Biomechanics, im Druck.
- [25] S. Zachow, Th. Hierl, B. Erdmann. A quantitative evaluation of 3D soft tissue prediction in maxillofacial surgery planning. *Proc. 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboter-assistierte Chirurgie (CD, www.curac.org/curac04/prog-curac.htm)*, 2004.
- [26] S. Zachow, H.-C. Hege, P. Deuffhard. Computergestützte Operationsplanung in der Gesichtschirurgie. *Proc. VDE Kongress – Innovationen für Menschen*, Fachtagungsberichte DGBMT - GMM - GMA, Band 2, S. 53–58, 2004.
- [27] A. Westermarck, S. Zachow, B. Eppley. 3D osteotomy planning in maxillofacial surgery, including soft tissue prediction. *Journal of Craniofacial Surgery*, 16(1):100–104, 2005.
- [28] S. Zachow, H.-C. Hege, P. Deuffhard. Maxillofacial surgery planning with 3D soft tissue prediction – Modeling, planning, simulation. *2. Int. Conf. on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction*, Banff, Abstract 33, p. 64, 2005.
- [29] A. Westermarck, S. Zachow. 3D osteotomy planning in maxillofacial surgery including 3D soft tissue prediction. *2. Int. Conf. on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction*, Banff, Abstract 35, p. 65, 2005.

- [30] S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz, M. Stiller. Reconstruction of mandibular dysplasia using a statistical 3D shape model. *Computer Assisted Radiology and Surgery*, Berlin, Germany, 21.–25. Juni, S. 1238–1243, 2005.
- [31] S. Zachow, M. Weiser, H.-C. Hege, P. Deuffhard. *Soft Tissue Prediction in Computer Assisted Maxillofacial Surgery Planning: A Quantitative Evaluation of Histomechanical Modeling using Pre- and Postoperative CT-Data*, Erscheint in: Payan, Y. (ed.) *Biomechanics Applied to Computer Assisted Surgery*. Kap. 17, Research Signpost Publisher, 2005.

2.2.4 Biomedizinische Bildverarbeitung und Bildanalyse

Die Hauptaktivitäten im Jahre 2004 waren Verfahren zur Analyse besonders großer Bilddatensätze, etwa bei der Rekonstruktion von 3D-Geometrien aus hochaufgelösten mikroskopischen Schnittbildern oder bei der Analyse der Knochenfeinstruktur. Weiterhin wurden die Verfahren zur modellbasierten Segmentierung von 3D-Bilddaten weiterentwickelt. Das für viele biomedizinische Anwendungen zentrale Problem der Registrierung von 3D-Bilddaten wurde in Kooperation mit verschiedenen Partnern verstärkt in Angriff genommen und soll künftig weiter ausgebaut werden. Die Arbeiten zur Analyse von zerebralen Aneurysmen wurden fortgesetzt und führten zur Beantragung einer DFG-Forschergruppe. Ein neues Arbeitsfeld ist die visuelle Analyse von Tensorbildern.

Modellbasierte Segmentierung von 3D-Bilddaten

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

Kooperationspartner: Martin Seebass (Mercury Computer Systems), Peter Wust, Johanna Gellermann (Klinik für Strahlentherapie, Charité, Universitätsmedizin Berlin) Thomas Lange, Peter Schlag (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin) Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler (AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Bildsegmentierung ist eine der grundlegenden Aufgaben der quantitativ orientierten biomedizinischen Bildanalyse. Sie ist unter anderem Voraussetzung für computergestützte Therapie- und Operationsplanung (siehe S. 39). Daher wird weltweit an effizienten, robusten und automatischen Segmentierungsverfahren gearbeitet, die den harten Anforderungen der klinischen Routine gerecht werden.

Segmentierung ist im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe, da die gesuchten Objekte in den Daten häufig nur schwer vom Hintergrund zu trennen sind. Die Ursachen hierfür liegen sowohl in den Charakteristika der Bildmodalitäten (z.B. CT, MRT, US) als auch den Abbildungseigenschaften der Objekte selbst begründet. Trotz Rauschen, Inhomogenitäten innerhalb des Objekts oder Homogenität über verschiedene Objekte hinweg müssen Objektgrenzen erkannt werden. Dies kann z.B. durch Einbeziehung von a-priori Wissen über Form, Grauwertverteilung und Textur der zu segmentierenden Objekte geschehen. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Methoden zur Nutzung von solchem a-priori Wissen im Segmentierungsprozess.

Formwissen lässt sich beispielsweise mittels statistischer Analyse einer Menge von Trainingsdaten erfassen [5]. Dabei wird jede Form nach Berechnung einer sogenannten Korrespondenzabbildung (siehe S. 74) als Element eines Vektorraumes – dem sogenannten Shape Space –

dargestellt. Eine Hauptkomponentenzerlegung (PCA) liefert die wesentlichen Freiheitsgrade als Variablen eines statistischen Modells.

Die Aufgabe der Segmentierung liegt nun darin, diese Freiheitsgrade so zu bestimmen, dass das Modell möglichst genau das zu segmentierende Objekt in den Bilddaten beschreibt (vgl. Abbildung 2.16). Dazu werden die Bewegungsgleichungen für ein deformierbares Modell gelöst. Durch die externen Kräfte in der Bewegungsgleichung kann in Abhängigkeit von der gegebenen Anwendung zusätzliches Wissen über die zu segmentierenden Bilddaten in den Segmentierungsprozess eingebracht werden; an jedem Punkt des Modells wird hierfür ein Deformationsvektor definiert. Die externen Kräfte erhält man aus der Projektion des Deformationsfeldes auf die Freiheitsgrade des Modells. Die Projektion ist durch die Lösung eines Minimierungsproblems gegeben. Sowohl für die Segmentierung von Leber- als auch Beckendaten wurden solche Deformationsfelder definiert und die Segmentierungsergebnisse evaluiert [7, 6].

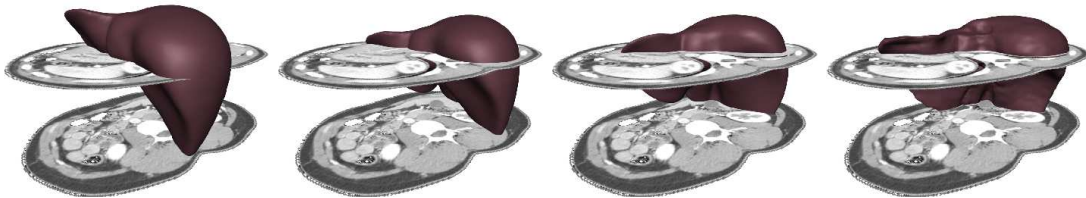


ABBILDUNG 2.16: Verschiedene Schritte während der Anpassung eines deformierbaren statistischen Modells der Leber an CT Daten.

Parametrische Bildregistrierung

Bearbeitet von: Thomas Wenckebach, Hans Lamecker, Alexander Maye, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Martin Seebaß, Olaf Eitzmuß (Mercury Computer Systems), Thomas Lange (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Ein zentrales Werkzeug der biomedizinischen Bildverarbeitung und -analyse ist die Bildregistrierung. Ihre Aufgabe besteht darin, unter Minimierung eines Ähnlichkeitsmaßes eine geometrische Transformation zu finden, die eine Korrespondenz zwischen anatomischen Strukturen liefert. Registriert werden Grauwertbilder (CT, MR, konfokale Mikroskopie), aber auch daraus abgeleitete Repräsentationen (Label-/ Distanzfeld, Triangulierung).

Die *starre* Bildregistrierung erlaubt nur Translation und Rotation, während bei der *affinen* Bildregistrierung zusätzlich Skalierung und Scherung möglich sind. In vielen Fällen reicht eine affine Transformation für eine zufriedenstellende Korrespondenz nicht aus, z.B. wenn eine anatomische Struktur im Verlauf einer dynamischen Bildgebung deformiert wird (siehe S. 43) [8, 9]. Deformationen größeren Ausmaßes gilt es bei der Abbildung anatomischer Strukturen verschiedener Individuen aufeinander zu beschreiben (Intersubjektregistrierung, vgl. S. 52 und 65).

Durch Interpolation von Steuergitterkoordinaten, auf denen kubische B-Spline-Basisfunktionen definiert sind, werden Deformationen modelliert. Als Standardähnlichkeitsmaß für

Voxelbilder hat sich Mutual Information durchgesetzt: Die gemeinsame Entropie, also der Informationsgehalt nach Shannon, wird minimal, wenn die Bilder sich bestmöglich überdecken. In einem Multiskalenverfahren (Parameter- und Datenpyramide) werden die Parameter der geometrischen Transformation durch Gradientenverfahren optimiert.

Ein Schwerpunkt lag auf der Evaluation der Eignung von B-Spline-Deformationen für Intersubjektregistrierungen menschlicher Organe. Um das Verhalten des Deformationsmodells genauer studieren zu können, wurde von Grauwertbildern abstrahiert und stattdessen wurden Oberflächen registriert. Der Einfluss verschiedener etablierter, in diesem Kontext aber neuartiger Oberflächenrepräsentationen, Ähnlichkeitsmaße und Optimierungsstrategien auf die Güte der Korrespondenz wurde analysiert [10]. Es wurden typische Deformationen, die bei der Registrierung von Leber bzw. Beckenknochen auftreten, identifiziert und mit Hilfe synthetischer Formen isoliert untersucht. Die Resultate können als Beitrag zur Bewertung intensitätsbasierter Registrierungsverfahren angesehen werden.

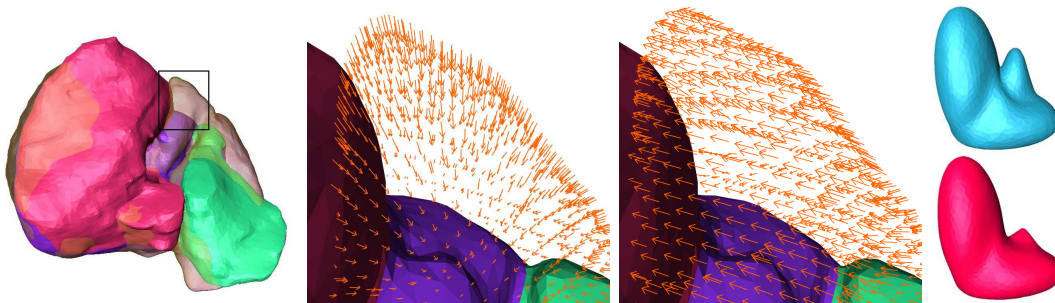


ABBILDUNG 2.17: Leberdeformation und idealisierte Situation: Korrespondierende Strukturen sind in unterschiedlichem Maße ausgeprägt. Von links nach rechts: Referenz und zu transformierende Leber (transparent), Verschiebungsvektoren für korrekte Lösung, für falsche Lösung, entsprechende Testobjekte.

Rekonstruktion von Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschritten

Bearbeitet von: Vincent Dercksen, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege, Christoph Petz

Kooperationspartner: Udo Seiffert, Sabine Gubatz (Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung, Gatersleben)

Förderung: BMBF-Verbundprojekt Bioinformatics Center Gatersleben-Halle

Die Arbeitsgruppe Wissenschaftliche Visualisierung ist im Rahmen des Projektes *Erkennung räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster* am Bioinformatik-Zentrum Gatersleben-Halle (BIC-GH) beteiligt. Das Projektziel ist es, Algorithmen und Werkzeuge zur einfacheren und schnelleren Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschritten zu entwickeln (siehe Abbildung 2.18). Zusätzlich soll die Integration von Genexpressionsdaten und anderen Informationen in solche Modelle untersucht werden. Alle Methoden werden exemplarisch zur Rekonstruktion von 3D-Modellen des sich entwickelnden Gerstenkorns angewandt. Neben der Vorbereitung der Präparate und der Bildaufnahme unter dem Mikroskop bestehen die Teilaufgaben bei der Modellerstellung aus dem Zusammensetzen und Alignieren der Schnittbilder, der Segmentierung, der Flächenrekonstruktion sowie dem Glätten und Simplifizieren der resultierenden Polygonmodelle.

Alle Schritte zur Modellerstellung wurden im Rahmen des 3D-Visualisierungssystems Amira implementiert und erfolgreich zur Erstellung von 3D-Modellen von Gerstenkörnern in verschiedenen Entwicklungsstadien eingesetzt. Der Schwerpunkt der Arbeiten im Jahr 2004 lag auf der Alignierung der Schnittbilder. Unter anderem wurden Lösungen zur Verarbeitung sehr großer Bildstapel implementiert, neue Methoden zur schnellen Erstellung orthogonaler Ansichten entwickelt sowie GPU-beschleunigte Verfahren zur schnellen automatischen Alignierung untersucht. Dadurch wurde die Leistungsfähigkeit des in Amira integrierten Alignierungsmoduls deutlich verbessert. Weiterhin wurde damit begonnen, Algorithmen zur elastischen Registrierung aufeinanderfolgender Schnittbilder zu untersuchen. Mit Hilfe solcher Algorithmen sollte die Qualität der erstellten Pflanzenmodelle erheblich verbessert werden können und die Notwendigkeit zur nachträglichen Bearbeitung und Glättung der resultierenden Modelle entfallen. Zusätzlich sind solche Algorithmen erforderlich für die Integration von Experimentdaten, wie z.B. Genexpressionsdaten, in Referenzmodellen.

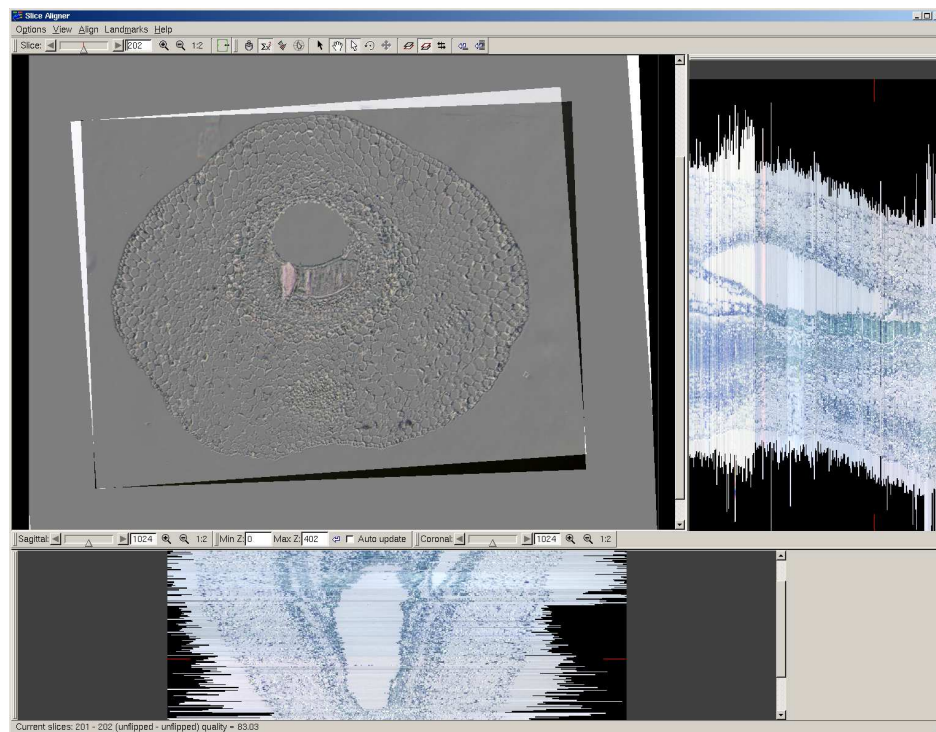


ABBILDUNG 2.18: Das in Amira integrierte Modul zur Alignierung von Schichtbildern. Gezeigt werden die paarweise Ausrichtung von zwei aufeinander folgenden Gerstenkornschnitten und zwei orthogonale Ansichten (rechts und unten), die den aktuellen Status in der axialen Richtung veranschaulichen.

Analyse der Knochenfeinstruktur

Bearbeitet von: Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Peter Fratzl, Peter Saporin und Richard Weinkamer (MPI für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Golm), Gisela Beller, Wolfgang Gowin und Dieter Felsenberg (Zentrum für Muskel- und Knochenforschung Charité, Universitätsmedizin Berlin), Jürgen Kurths und Norbert Marwan (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)

In der zweiten Phase (2003–2005) des Projekts “2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity” werden neue Methoden entwickelt, um die Knochenstruktur und pathologische Veränderungen zu quantifizieren. Hierbei werden komplette Wirbelkörper in einer Auflösung von etwa 40μ in einem Micro-CT aufgenommen. Eine einzige solche Aufnahme produziert Daten in der Größenordnung von 10 GB. Die Speicherung der Daten und der Zugriff aller beteiligter Institutionen zur Auswertung und Visualisierung stellt eine beträchtliche Herausforderung dar.

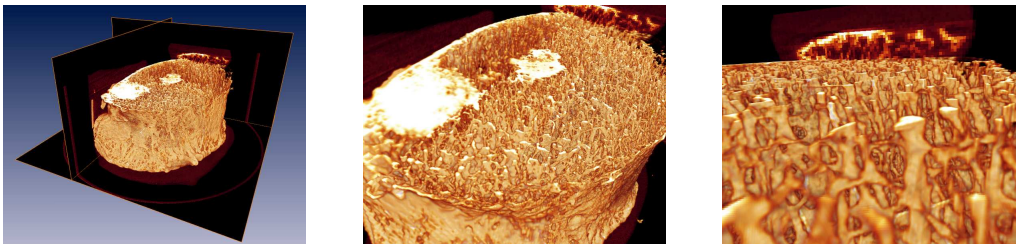


ABBILDUNG 2.19: Mikro-CT Aufnahme eines Wirbelkörpers von verschiedenen Blickpunkten. Gesamtgröße des Datensatzes: ca. 8 GB bei einer Voxelgröße von 37μ .

Die Daten werden zentral gespeichert. Der Zugriff geschieht über das Internet. Eine Visualisierung der Datensätze in der höchsten Auflösung macht nur für Teilbereiche Sinn. Dort ist sie jedoch nötig, um die komplexe innere Struktur des menschlichen Knochens zu zeigen (Abbildung 2.19). Visualisierungsverfahren wurden erweitert und sind jetzt in der Lage, Bilddaten progressiv im Hintergrund zu übertragen [3]. Dabei werden mehrere Auflösungsstufen verwendet, um jederzeit einen grob aufgelösten Überblick, zusammen mit Details um einen Fokus herum, zu bieten. Die Kooperationspartner verwenden dieses System zur Neu- und Weiterentwicklung von Auswertungsverfahren. Unter anderem wurden komplette Wirbelkörper vor und nach einem Bruchtest aufgenommen. Erste Schritte wurden unternommen, die Veränderungen in der Mikro-Struktur sichtbar zu machen. Außerdem wurde an der Weiterentwicklung von Komplexitätsmaßen gearbeitet [4].

Patientenspezifische Analyse zerebraler Aneurysmen

Bearbeitet von: Christoph Petz, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Leonid Goubergrits, Klaus Affeld (Labor für Biofluidmechanik, Universitätsmedizin Berlin), Andreas Spuler (Neurochirurgische Klinik, Helios Klinikum Berlin-Buch)

Ein zerebrales Aneurysma ist potentiell lebensbedrohlich. Die Sterberate nach einer akuten Blutung infolge der spontanen Ruptur eines Aneurysmas liegt bei etwa 50%. Wird ein solches Aneurysma rechtzeitig entdeckt, muss entschieden werden, ob ein operativer Eingriff nötig ist und welche Form der Therapie die besten Erfolgsaussichten hat. Gemeinsam mit den Partnern wird ein Risikomodell entwickelt, das eine patientenspezifische Risikoanalyse nach Form und Lokalisation des Aneurysmas ermöglichen soll.

Die Risikoabschätzung basiert auf einer Analyse der Eigenschaften des Blutstromes durch das Aneurysma. Die Strömungscharakteristika sind wiederum wesentlich bestimmt durch dessen individuelle Geometrie. In diesem Projekt werden Methoden und Werkzeuge entwickelt, die die individuelle, patientenspezifische Analyse ermöglichen. Ausgehend von 3D-Bildern werden Methoden zur Segmentierung, Rekonstruktion von Gefäßmodellen und Gittergenerierung entwickelt. Die Visualisierung und Analyse der berechneten Strömungsdaten bilden einen weiteren Schwerpunkt. Für die weitere Durchführung des Projektes wurde ein Antrag auf Förderung bei der DFG gestellt.

Tensorfelder in der Medizin

Bearbeitet von: Werner Benger, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Hauke Bartsch (Mercury Computer Systems), Hagen Kitzler (TU Dresden), Annett Werner (TU Dresden), Anna Shumilina (TU Berlin)

Eine noch relativ junge Variante des etablierten Magnetresonanzverfahrens zur Bildgewinnung erlaubt die Messung der Diffusion von Wassermolekülen in lebendem Gewebe. Die Eingrenzung der Bewegungsfreiheit beispielsweise durch biologische Membranen bewirkt hierbei eine anisotrope Restriktion der Diffusion, wodurch sich insbesondere myelinisierte Axone (Nervenfasern der neuronalen Zellen) im menschlichen Gehirn vom umgebenden Gewebe (graue Hirnrinde - Cortex - mit isotropen Eigenschaften) unterscheiden. Anisotrope Diffusion wird durch symmetrische Tensorfelder beschrieben, wie sie auch als metrische Tensorfelder in der Relativitätstheorie auftreten. Es wurde daher untersucht, inwieweit die für diesen Bereich vorhandenen direkten Visualisierungsmethoden (siehe S. 63) [11] auch für die medizinischen Tensorfelder nützlich sein könnten.

Die häufigsten Gehirntumore vom sogenannten neuroepithelialen Typ (Gliome) sollten durch unterschiedliches Diffusionsverhalten in den entsprechenden Messungen sichtbar sein, da sie die physiologische Matrix infiltrieren und destruieren. Mit üblichen skalaren Bildgebungsverfahren ist keine klare Eingrenzung möglich. Aufgrund zellbiologischer Überlegungen erwartet man jedoch in Tumorgewebe vorwiegend isotrope Diffusion sowie eine unterschiedliche absolute Diffusionsgeschwindigkeit. Die Visualisierungsverfahren wurden daher dahingehend angepasst, dass alle relevanten Eigenschaften gleichzeitig dargestellt werden können. Die neue Technik der „Tensor Patterns“ erlaubt im Gegensatz zu den vielerorts üblichen „Fiber-Tracking-Verfahren“ die lokale Analyse der Gewebetypen und damit eine Einschätzung möglicher Infiltration von Nervengewebe durch den Tumor [12]. Dieses Verfahren ist auch unempfindlich gegenüber numerischen und messtechnischen Artefakten, was insbesondere in der Planung von chirurgischen Eingriffen von unschätzbarem Wert sein kann. Fiber-Tracking-Verfahren sind bekanntermaßen numerisch instabil und unvermeidlich abhängig von dem verwendeten Interpolationsverfahren des Tensorfeldes.

Nachdem erste Testergebnisse (siehe Abbildung 2.20) durchaus vielversprechend erscheinen, werden weitere Arbeiten anhand unterschiedlicher Tumortypen das Potential der Eignung in der medizinischen Therapieplanung und Praxistauglichkeit untersuchen.

Publikationen

- [1] L. Goubergrits, C. Petz, D. Stalling, A. Spuler, K. Affeld, *Experimental and Numerical Dye Washout Flow Visualization*, Journal of Visualization 7(3), Japan, 2004, pp. 233-240.

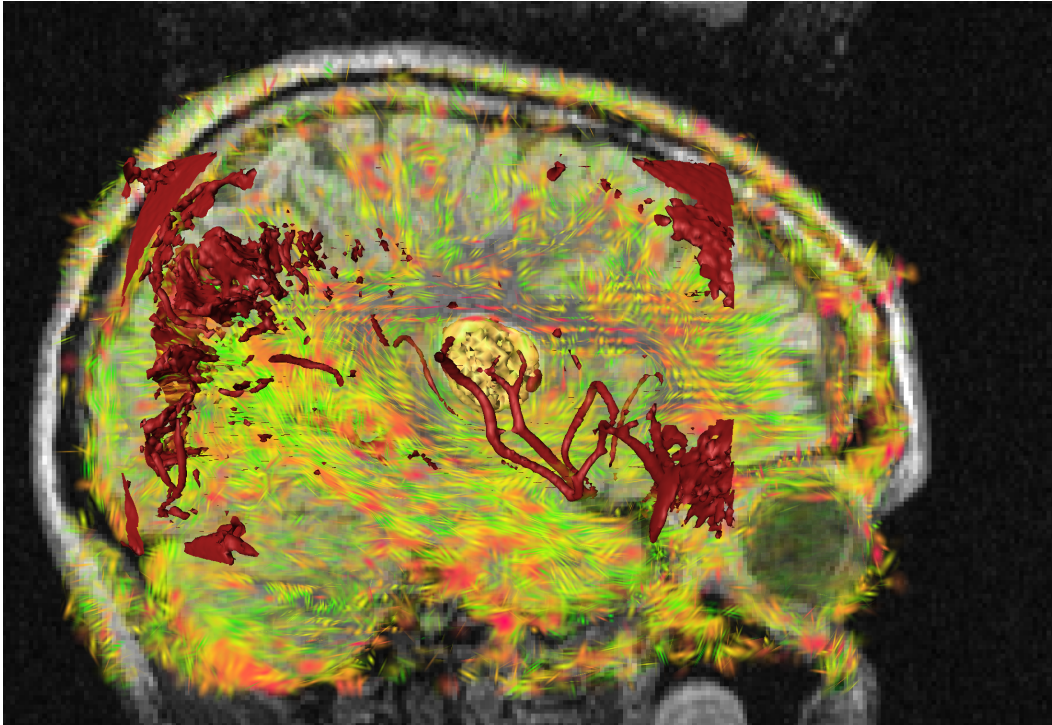
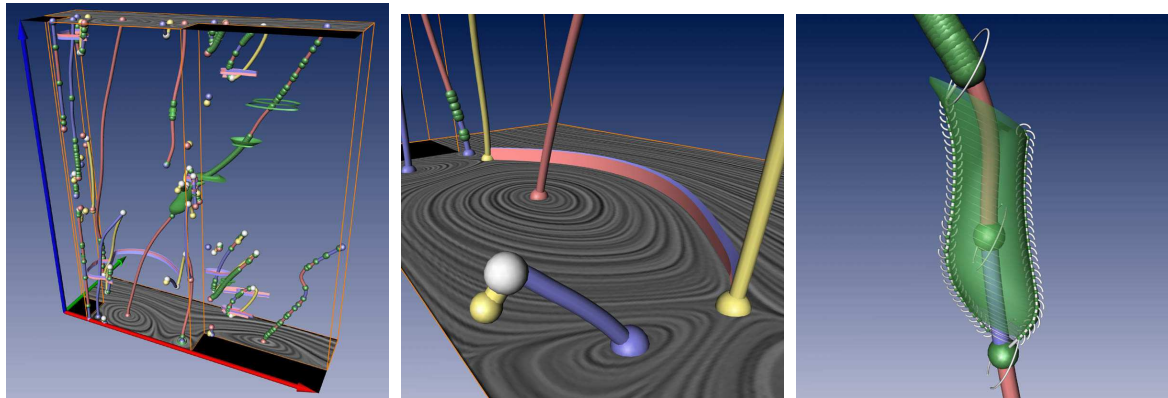


ABBILDUNG 2.20: Die Diffusion von Wassermolekülen ist in Nervenfasern anders als im umliegenden Gewebe. Diese Diffusion kann mit den entwickelten Verfahren zur Tensorfeldvisualisierung dargestellt werden, wobei hier erstmals besonders die lokalen Abweichungen der Gewebetypen deutlich sichtbar werden. Dargestellt ist das Diffusionstensorfeld vor einem Graustufenbild einer T_2 -gewichteten Aufnahme, dazu zur Orientierung eine dreidimensionale Geometrie von Adern die aus einer T_1 -Aufnahme gewonnen wurde und nur einen Teilbereich des Gehirnes überdeckt.

- [2] C. Petz, D. Stalling, L. Goubergrits, K. Affeld, A. Spuler, *Validierung von Strömungssimulationen in kardiovaskulären Anwendungen*, Proc. BVM, 2004, pp. 356–360.
- [3] S. Prohaska, A. Hutanu, R. Kähler, H.-C. Hege, *Interactive exploration of large remote micro-CT scans*, Proc. IEEE Visualization '04 (Austin, Texas), 2004, pp. 345–352.
- [4] P. Sapiro, J.S. Thomsen, S. Prohaska, A. Zaikin, J. Kurths, H.-C. Hege, W. Gowin, *Quantification of Spatial Structure of Human Proximal Tibial Bone Biopsies Using 3D Measures of Complexity*, Acta Astronautica, 56(9-12), pp. 820-830, 2005.
- [5] H. Lamecker, M. Seebass, T. Lange, H.-C. Hege, P. Deuffhard, *Visualization of the Variability of 3D Statistical Shape Models by Animation*, Proceedings MMVR (J.D. Westwood et al., eds.), Studies in Health Technologies and Informatics 98, IOS Press, 2004, pp. 190-196.
- [6] H. Lamecker, M. Seebass, H.-C. Hege, P. Deuffhard, *A 3D Statistical Shape Model of the Pelvic Bone For Segmentation*, Proceedings of SPIE - Volume 5370 Medical Imaging 2004: Image Processing (J.M. Fitzpatrick, M. Sonka, eds.), May 2004 pp. 1341-1351.
- [7] H. Lamecker, T. Lange, M. Seebass, *Segmentation of the Liver using a 3D Statistical Shape Model*, Report 04-09, ZIB, 2004.
- [8] T. Lange, T. Wenckebach, H. Lamecker, M. Seebass, M. Hünerbein, *Registration of Different Phases of Contrast-Enhanced MR Data for Liver Surgery*, 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer-Roboterassistierte Chirurgie CURAC, 2004.
- [9] T. Lange, T. Wenckebach, H. Lamecker, M. Seebass, M. Hünerbein, S. Eulenstein, P.-M. Schlag, *Registration of Portal and Hepatic Venous Phase of MR/CT data for Computer-Assisted Liver Surgery Planning*, Proceedings CARS 2005, accepted for publication.
- [10] T. Wenckebach, *Volumetrische Registrierung zur medizinischen Bildanalyse*, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Informatik, Dez. 2004.
- [11] W. Benger, H.-C. Hege, *Tensor Splats*, In: Visualization and Data Analysis 2004, Proc. of SPIE Vol. 5295, pp. 151-162, June 2004.
- [12] W. Benger, H. Bartsch, H.-C. Hege, H. Kitzler, A. Shumilina, A. Werner, *Visualizing Neuronal Structures in the Human Brain via Diffusion Tensor MRI*, eingereicht bei Int. Journal of Neuroscience

2.2.5 Virtuelle Labore

Unter *virtuellen Labors* verstehen wir anwendungsspezifische, integrierte Softwaresysteme, die es erlauben, berechnete und gemessene Daten zu importieren und Probleme aus dem jeweiligen Anwendungsbereich – nach Möglichkeit komplett – zu lösen. Im folgenden werden virtuelle Labore für die Anwendungsgebiete Strömungsmechanik, Schiffskonstruktion, Astrophysik, Neuroanatomie und Landschaftsplanung vorgestellt.



(a) Lokale und globale Ereignisse. (b) Detailansicht eines Sattelpunkts. (c) Detailansicht einer über die Zeit verfolgten geschlossenen Stromlinie.

ABBILDUNG 2.21: Topologisches Skelett einer zeitabhängigen 2D-Kavitätsströmung. Die Zeitachse weist nach oben.

Virtuelles Strömungslabor

Bearbeitet von: Tino Weinkauff, Jan Sahner, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Bernd R. Noack, Markus Schatz, Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin); Holger Theisel, Hans-Peter Seidel (Max-Planck-Institut für Informatik Saarbrücken); George Haller (Department of Mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, USA)

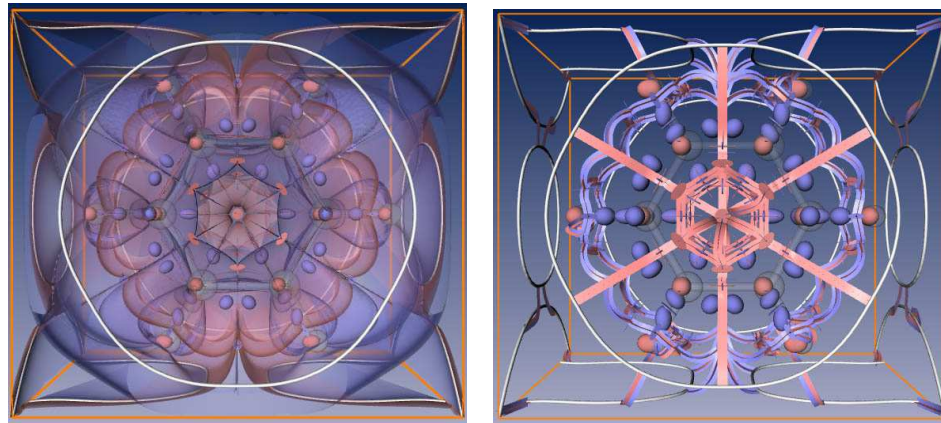
Förderung: DFG-Sonderforschungsbereich 557 “Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen”

In diesem Projekt entsteht ein virtuelles Labor zur Visualisierung von Vektorfeldern, welches die in Amira vorhandenen Methoden erweitern und ergänzen soll. Dies beinhaltet insbesondere Methoden zur merkmalsbasierten Analyse von zeitabhängigen Strömungsfeldern.

Seit Mitte 2004 wird dieses Projekt im Sfb 557 (“Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen”) als Teilprojekt “Simulation und merkmalsbasierte Analyse von Hochauftriebskonfigurationen mit aktiver Strömungskontrolle” in Zusammenarbeit mit der Gruppe von F. Thiele durchgeführt. Die enge Kopplung von Simulation und visuell gestützter Analyse soll die Praxisbezogenheit der zu entwickelnden Methoden sicherstellen und insbesondere sollen die Erkenntnisse aus der Visualisierung zur Verbesserung der Simulationen verwendet werden und zu einem besseren Verständnis des Einflusses verschiedener physikalischer Parameter beitragen.

Die Reduktion von Strömungen auf ihre wesentlichen, bestimmenden Eigenschaften durch eine merkmalsbasierte Analyse und die anschließende Darstellung und Weiterverarbeitung dieser Merkmale bietet u.a. folgende Vorteile:

- das Verständnis für die physikalischen Prozesse in der Strömung wird verbessert
- die visuelle Komplexität der Darstellungen wird verringert
- auch große Datenmengen lassen sich interaktiv darstellen
- Strömungen können auf Basis ihrer Merkmale verglichen werden.



(a) Separationsflächen ausgehend von Boundary Switch Curves und Sattelpunkten.
 (b) Die Nutzung von Sattelkonnektoren zur Darstellung erhöht die Expressivität.

ABBILDUNG 2.22: Topologie des elektrostatischen Feldes des Benzolmoleküls.

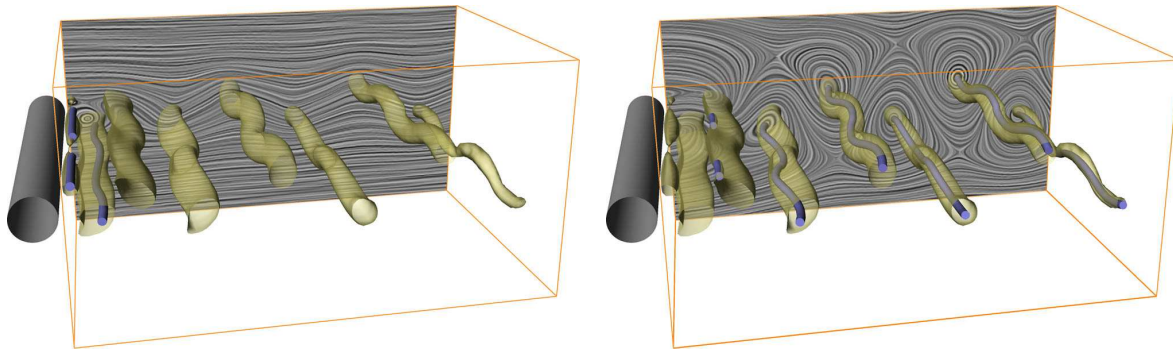
Im Jahr 2004 wurden neue Methoden zur topologischen Analyse von 2D-zeitabhängigen Strömungsfeldern in das virtuelle Strömungslabor integriert. Hierbei wurde insbesondere Wert auf die Detektion von lokalen und globalen Bifurkationen gelegt. Dabei handelt es sich um Punkte oder Linien in der Raumzeit, die strukturelle Änderungen des topologischen Skelettes anzeigen [8, 7]. Abbildung 2.21 verdeutlicht dies am Beispiel einer kompressibel gerechneten Kavitätsströmung.

Der im Jahr 2003 entwickelte Algorithmus zur Extraktion von Sattelkonnektoren wurde im Berichtszeitraum erweitert auf die von den Rändern eines Vektorfeldes ausgehenden Separationsflächen [9]. Die somit extrahierten Boundary Switch Connectors ermöglichen zusammen mit den Sattelkonnektoren expressive Darstellungen der topologischen Separation in einem Vektorfeld (Abbildung 2.22).

Das virtuelle Strömungslabor wurde um Mechanismen zur Wirbelerkennung und Wirbelvisualisierung erweitert. Wirbel spielen in der Strömungsmechanik eine große Rolle, da sie in allen Anwendungsgebieten eine Reihe von erwünschten und unerwünschten Effekten auslösen. Zum Beispiel erzeugen sie den Auftrieb von Tragflügeln und können ihn aber ebenso zerstören. Außerdem sorgen sie für die Durchmischung von Brennstoff und Sauerstoff in Brennkammern oder sie können in Blutgefäßen zur Behinderung des Blutflusses führen. Eine Reihe von bekannten Feldgrößen zur Wirbelvisualisierung wurden implementiert. Die wichtigsten darunter sind die Skalarfelder λ_2 und Q , die in Navier-Stokes-Strömungen durch ihr Vorzeichen Wirbelregionen detektieren.

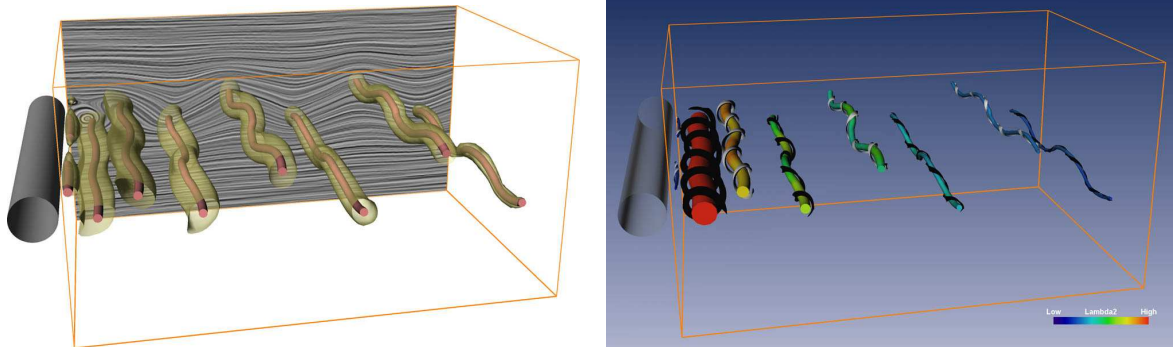
Weitere Entwicklungen wurden im Bereich der Extraktion von Wirbelkernlinien durchgeführt, gewisser Linien also, um die die Strömung zirkuliert. Hier wurde der State-of-the-Art-Algorithmus [5] implementiert, der jedoch Ergebnisse liefert, die von der Geschwindigkeit des Betrachters relativ zur Strömung abhängen, siehe Abbildung 2.23 – d.h. dieses Verfahren ist nicht Galilei-invariant.

Es konnte ein neues, Galilei-invariantes Extraktionsverfahren entwickelt werden, das alle Wirbelstrukturen unabhängig von der Geschwindigkeit des Betrachters erkennt [6]. Das bisherige



(a) Nach Sujudi und Haines berechnete Wirbelkernlinien bei einer gegebenen Betrachtergeschwindigkeit.

(b) Nach Sujudi und Haines berechnete Wirbelkernlinien bei einer anderen Betrachtergeschwindigkeit als bei (a). Siehe auch die im LIC-Bild (Ebene im Hintergrund) zusätzlich erkennbaren Wirbel im Nachlauf.



(c) Mit dem neuen, Galilei-invarianten Verfahren berechnete Wirbelkernlinien. Alle Merkmale werden unabhängig von der Betrachtergeschwindigkeit detektiert.

(d) Darstellung der Galilei-invarianten Wirbelkernlinien.

ABBILDUNG 2.23: Wirbelstrukturen in der Strömung um einen Zylinder. Wirbelgebiete gemäß dem λ_2 -Indikator werden als transparente Flächen gezeigt.

State-of-the-Art-Verfahren müsste mehrmals mit unterschiedlichen Relativgeschwindigkeiten angewendet werden, um dies zu garantieren. Abbildung 2.23 zeigt die Vorteile des neuen Verfahrens.

Virtuelles Schiffsbassin

Bearbeitet von: Christoph Petz, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Hamburgische Schiffbau-Versuchsanstalt GmbH (HSVA), Maritime Research Institute Netherlands (MARIN), FRIENDSHIP-Systems GmbH, University of Strathclyde

Förderung: EU-Projekt (VIRTUE) – Finanzierung ab 2005

In dem VIRTUE (VIRTual Tank Utility in Europe) Projekt wird ein virtuelles Versuchslabor entwickelt, in dem unterschiedliche Aspekte eines Schiffmodells mit Hilfe numerischer Methoden untersucht werden können. Diese Aspekte umfassen die Voraussage des Wasserwiderstandes und damit den Energieverbrauch eines fahrenden Schiffes, die Stabilität im

Wasser bei Wellengang, Steuerungseigenschaften des Schiffes und Kavitationseffekte am Propeller. Führende europäische Spezialisten aus den jeweiligen Fachgebieten integrieren bereits bestehende und neu zu entwickelnde Methoden in eine gemeinsame Plattform.

Vorarbeiten zur Datenintegration in Amira sowie weitere Projektkoordinationen und die Entwicklung von Zielsetzungen sind bereits durchgeführt worden. Weitere Herausforderungen liegen in der FEM Nachbearbeitung, Datenanalyse und Visualisierung der berechneten Ergebnisse. Die Behandlung unterschiedlicher Gittertypen und die Verarbeitung großer Datenmengen erfordern die Entwicklung spezieller Algorithmen.

Virtuelles Astrophysik-Labor

Bearbeitet von: Werner Bengel, Ralf Kähler, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Ed Seidel, Louisiana State University (LSU), USA, Denis Pollney, Albert-Einstein-Institut (AEI), Potsdam/Golm, John Shalf, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, San Francisco, Kalifornien, USA, Stefan Heusler (Arts of Science), Universität Essen, Fachbereich Physik

Förderung: Max-Planck-Gesellschaft

Die besondere Herausforderung für die Visualisierung in der allgemeinen Relativitätstheorie besteht einerseits in der Größe der bei den numerischen Simulationen anfallenden Datenmengen und andererseits der Vielzahl der Tensorfeldvariablen, die visuell verständlich dargestellt werden müssen. Nicht zuletzt ist auch die Vermittlung des Konzeptes einer "Raum-Zeit" an sich ein noch offenes Thema.

Zur Behandlung großer, zeitabhängiger Datenmengen wurden die Amira-Erweiterungen für numerische Relativitätstheorie auf einer 64-Bit-Architektur eingesetzt. Die interaktive Visualisierung eines bereits im Jahre 2002 berechneten großen Datensatzes von 600GB am Arbeitsplatz eines Wissenschaftlers ist damit in den Bereich des Möglichen gerückt. Eine Beispielvisualisierung aus diesem Datensatz, der erstmalig einen fast vollständigen Orbit eines Binärsystems Schwarzer Löcher simulierte, zeigt Abbildung 2.24. Von besonderer Relevanz

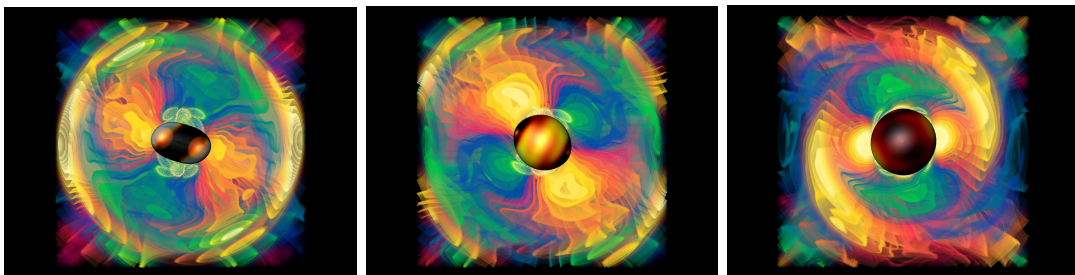


ABBILDUNG 2.24: Gravitationswellen, wie sie während des letzten Orbits (also kurz vor der Kollision) zweier Schwarzer Löcher entstehen. Visualisierung aus einem 600GB Datensatz.

ist hierbei auch, dass es sich bei den relativistischen Daten nicht um einzelne, unabhängige Datenblöcke handelt, sondern um mehrere Datenfelder, die in physikalisch gegebener Beziehung zueinander stehen. Hierfür wurde in den Vorjahren ein Datenmodell in Anlehnung an das mathematische Modell von Faserbündeln entwickelt, das die semantischen Strukturen der Relativitätstheorie auf computergraphisch nutzbare Elemente abbildet. Damit ist es möglich,

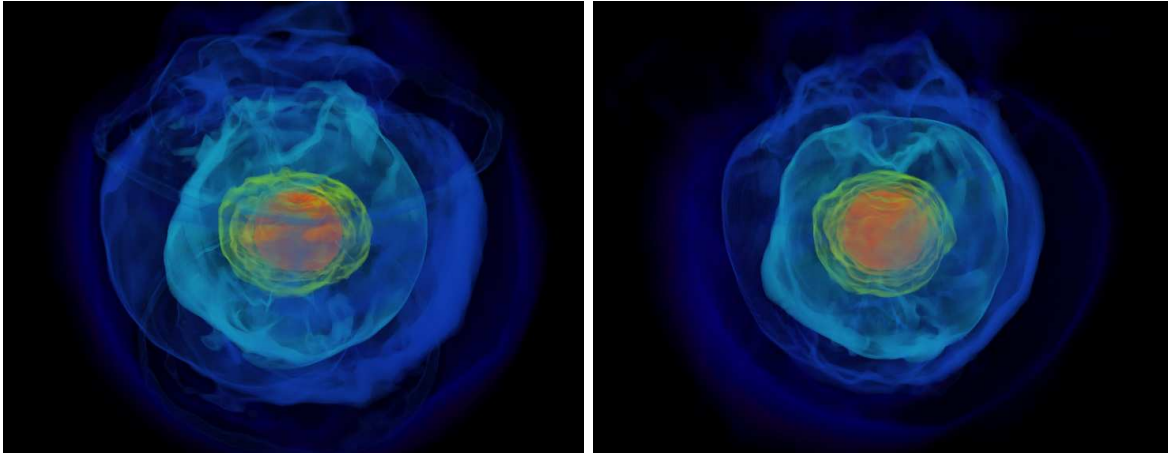


ABBILDUNG 2.25: Die Bilder zeigen zwei Zeitschritte einer adaptiven, relativistischen Simulation, die den Kollaps eines Sterns zu einem Neutronenstern beschreibt. Dargestellt sind volumetrische Schichten konstanter Gasdichte im Zentrum des stellaren Objekts.

in beliebigen Dimensionen auf einem regulären Gitter beispielsweise n -kubisch zu interpolieren, wobei die einzelnen Komponenten on-demand in den Arbeitsspeicher geladen werden. Das heisst, ein Datenfeld jenseits der durch den Arbeitsspeicher vorgegebenen Möglichkeiten kann von den Visualisierungsalgorithmen transparent als glatte Mannigfaltigkeit behandelt werden [1].

Die fundamentale Rechengröße in der Relativitätstheorie ist das sogenannte metrische Tensorfeld. Hierfür wurden bereits in den Vorjahren direkte Visualisierungen [2] entwickelt, welche auch die interaktive Exploration großer Datensätze erlauben. Das favorisierte Verfahren der „Tensor-Splats“ (bzw. der „Tensor Patterns“ als Erweiterung) wurde nun wahrnehmungspsychologisch untermauert. Der fünfdimensionale Wahrnehmungsraum von (a) Gesamtfarbe, (b) Ausrichtung und Orientierung, (c) Regelmässigkeit und Anordnungsregeln, (d) Farbreinheit sowie (e) Komplexität und „Gewicht“ gemäss [4] lässt sich dabei im Visualisierungsverfahren direkt wiederfinden. Die in der Wahrnehmungsforschung häufig verwendeten „Gabor Patches“ können zur direkten Darstellung eines Tensorfeldes eingesetzt werden und bieten damit eine nahezu optimale visuelle Darstellung des Datenraumes, wie sie von den „Tensor Patterns“ implementiert ist [3].

Der zweite Teil des Projektes befasst sich mit der Visualisierung von Daten die auf einem bestimmten Typ lokal verfeinerter Hexaedergitter definiert sind. Diese fallen bei einem 1989 von M. Berger vorgestellten numerischen Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen an, das als *Structured Adaptive Mesh Refinement (SAMR)* bezeichnet wird. Dieser Ansatz kombiniert die Vorteile strukturierter Gitter mit denen lokaler Gitterverfeinerung. Hierbei werden die Gleichungen zunächst auf einem groben, strukturierten Gitter gelöst. Mittels lokaler Fehlerschätzer werden Regionen, die höhere Auflösung benötigen, detektiert und durch Untergitter geringerer Zellgröße überdeckt. Mit der wachsenden Verbreitung dieses numerischen Verfahrens, insbesondere in der Kosmologie und in der relativistischen Astrophysik, steigt auch die Zahl der Wissenschaftler die geeignete, interaktive Visualisierungsverfahren zur Analyse zeitabhängiger Simulationsdaten auf SAMR-Gittern benötigen.

So werden am *MPI für Gravitationsphysik* seit kurzem die Einstein-Gleichungen auf dieser Art von Gittern gelöst. Damit es es erstmals möglich, einerseits die für die allgemeinrelativistische Simulation kosmischer Ereignisse erforderliche Gitterauflösung zu erreichen und andererseits genügend ausgedehnte Raumbereiche zu beschreiben, um auch großräumige Ereignisse zu simulieren, vgl. Abbildung 2.25. Es werden zum Beispiel die Ereignishorizonte kollidierender schwarzer Löcher mit hoher Auflösung berechnet, während die von ihnen ausgesandten Gravitationswellen deutlich geringer aufgelöst werden, um kostbare Rechenressourcen zu sparen. Um die im Projekt entwickelten direkten und indirekten Verfahren zur Volumenvisualisierung, wie zum Beispiel die Berechnung von artefaktfreien Isoflächen und hardware-beschleunigtes Volume Rendering, zur Darstellung dieser Simulationen zu verwenden, wurden Verfahren zur zeitlichen Interpolation angepasst. Insbesondere müssen gröbere Verfeinerungsstufen, die von der Simulationsumgebung nicht abgespeichert werden, durch geeignete Interpolationsverfahren zum Zeitpunkt der Visualisierung generiert werden. Ferner unterstützen nun alle adaptiven Visualisierungsmodule den Zugriff auf entfernte, im HDF5-Format gespeicherte AMR-Daten. Außerdem wurden Leseroutinen für vom Simulationspaket Cactus berechnete Ereignishorizonte, die als Multipatchdaten vorliegen, implementiert und die Unterstützung für vektorwertige AMR-Daten erweitert.

Virtuelles Neurolabor

Bearbeitet von: Peter Deuffhard, Ulrich Nowak, Alexander Maye, Hans-Christian Hege, Malte Westerhoff, Peter Dulovits

Kooperationspartner: Randolf Menzel, Carsten Duch, Neurobiologie, FU Berlin

Förderung: BMBF, Projekt „Virtual Brain“

Atlasbasierte Analyse der Konnektivität neuronaler Populationen im Bienenhirn. Die Methoden zur Registrierung individueller Datensätze in Gehirnatlanten wurden hinsichtlich Genauigkeit, Laufzeit und Robustheit weiterentwickelt, vgl. S. 53. Sie wurden zur Beantwortung konkreter, neuroanatomischer Fragen eingesetzt. So wurde beispielsweise untersucht, ob die Neuropilgebiete des PE1-Neurons mit denen der Kenyonzellen im Pilzkörper des Gehirns der Honigbiene synaptische Verbindungen unterhalten. Eine Voraussetzung dafür ist die räumliche Überschneidung beider Gebiete. Zur Klärung dieser Frage wurden mit dem Konfokalmikroskop aufgenommene Färbungen der Trakte der Kenyonzellen und des PE1-Neurons in den Gehirnatlas registriert und ihre Lagebeziehung analysiert. Die Abbildung 2.26d zeigt, dass sich beide Neuropile sowohl im Bereich der Aufspaltung des Kenyon-Trakts zu den Alpha- und Beta-Loben in der Domäne 1 als auch in den fingerartigen Strukturen der Domäne 2 überlappen. Synaptische Verbindungen in diesen Regionen sind somit wahrscheinlich.

In Zusammenarbeit mit der AG Menzel wurde ein Standardprotokoll zur Integration individueller Datensätze im Gehirnatlas der Honigbiene entwickelt. Damit können Anwender selbständig Daten in größerem Umfang in den Gehirnatlas einfügen. Der Atlas beinhaltet jetzt mehrere Projektionsneuronen, ein Rezeptroneuron, Glomeruli sowie Neuropile der A4- und Kenyonzellen. Die Registrierungsmethoden ermöglichen nicht nur die Verarbeitung von Konfokalmikroskopdaten, auch Golgi-Färbungen konnten erfolgreich im Atlas registriert werden.

Numerische Simulationsumgebung zur Untersuchung zeitlicher Signalintegrationseigenschaften von Einzelneuronen. Zur Vervollständigung der funktionellen Rekonstruktion einzelner Neuronen und als erster Schritt in Richtung realistischer Simulationen neuronaler

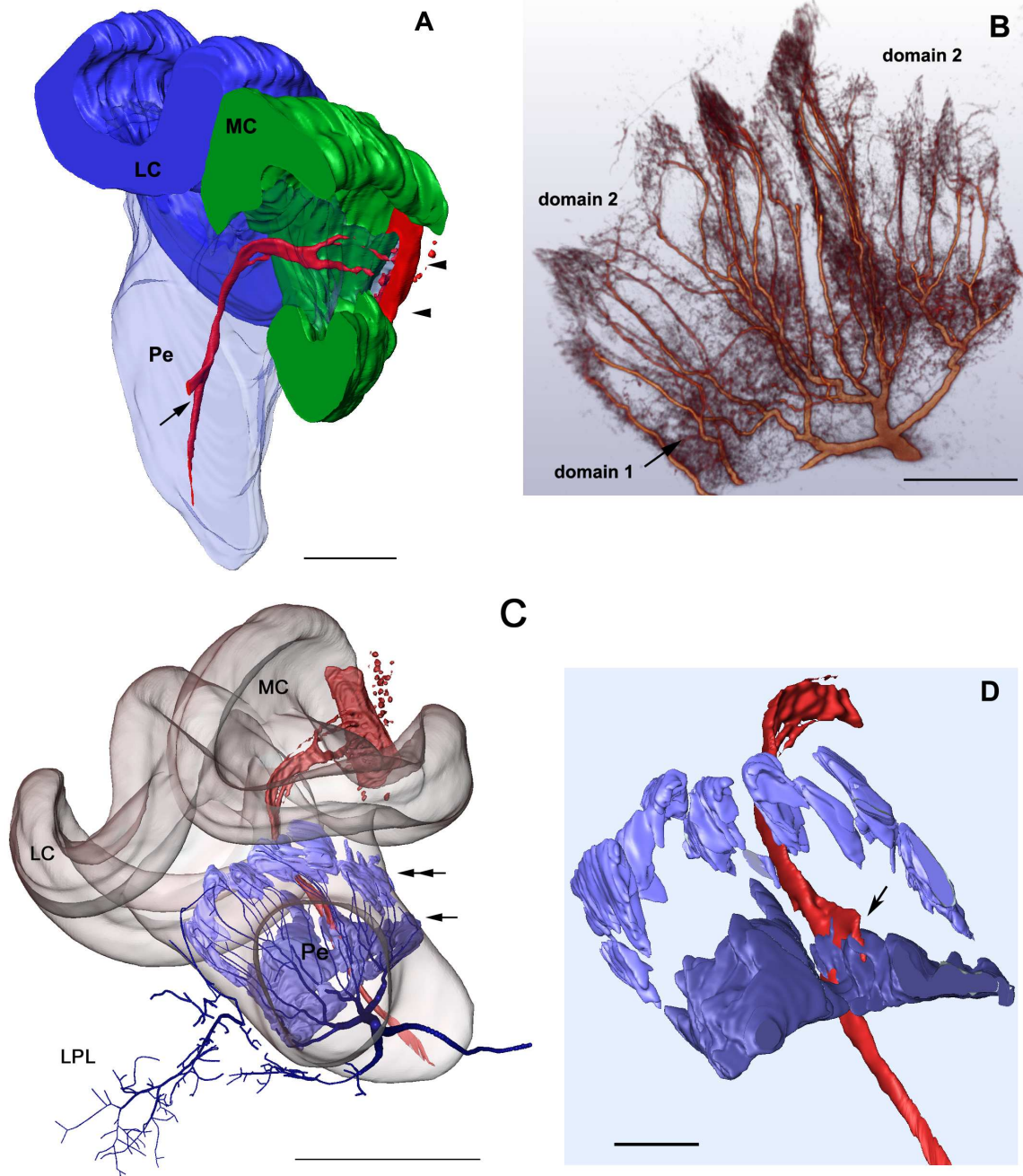


ABBILDUNG 2.26: **A** Lage der Kenyonzelltrakte (rot) im Pilzkörper des Gehirns der Honigbiene. Die Somata (Pfeilspitzen) liegen außerhalb des medialen Calyx (MC). Der Haupttrakt spaltet sich im Pedunculus (Pe) auf (Pfeil) und verzweigt in den Alpha-Lobus (nicht dargestellt) und den Beta-Lobus. Skalierung $100\mu\text{m}$, LC-lateraler Calyx. **B** 3D Volume-Rending des PE1-Dendriten im Pilzkörper. Skalierung $50\mu\text{m}$ **C** Gemeinsame Dartsellung der Kenyonzellen (rot) und des PE1-neurons (blau), die in zwei Individuen separat gefärbt und in den Atlas registriert wurden. Skalierung $200\mu\text{m}$. **D** Positionierung des PE1-Neurons (blau) gegenüber dem Kenyonzellentrakt (rot). Überlappungen sind im Bereich der Bifurkation des Trakts zu den Alpha- und Beta-Loben in Domäne 1 (Pfeil) sowie im Bereich von Domäne 2 (entspricht Doppelpfeil in Abb. C, s.a. Abb. B) zu sehen. (Abbildung: J. Rybak, Neurobiologie, FU-Berlin)

Netzwerke wurde die Möglichkeit geschaffen, Synapsen nach vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf einem Neuron zu platzieren. Die Verteilungen können vom Experimentator vorgegeben werden oder aus gemessenen Transmitterdaten stammen. Die Anregung der Synapsen kann nach verschiedenen zeitlichen Protokollen erfolgen. Damit lassen sich die Eigenschaften der zeitlichen Integration realer Neuronen untersuchen, wie z.B. Koinzidenzdetektion.

Mithilfe dieser Methoden wurden Simulationen der Signalausbreitung im Motorneuron MN5 der Motte (*manduca sexta*) und im PE1-Neuron im Bienenhirn (*apis mellifera*) durchgeführt. Beim MN5-Neuron standen die funktionellen Veränderungen im Laufe der Individualentwicklung im Vordergrund der Untersuchungen. Die Modelle basierten auf exakten Geometrierekonstruktionen des Neurons aus dem Larven-, Puppen- und Wandererstadium. Für die Simulation wurden die Aktivierungszeitpunkte der Synapsen aus Exponentialverteilungen gezogen, deren Parameter die Variation der Synchronität ermöglichten. Die Effektivität verschiedener Eingabemuster bei der Erzeugung eines Aktionspotentials des Neurons wurde verglichen. Dabei zeigte sich, dass das MN5-Neuron im Puppenstadium, in dem es am weitesten zurückgebildet und das Tier immobilisiert ist, am wenigsten zwischen Eingabemustern oder der Anzahl aktivierter Synapsen differenziert.

Beim PE1-Neuron wurden die Eigenschaften der einzelnen synaptischen Domänen untersucht (siehe Abbildung 2.27a). Hier konnte durch Simulationen gezeigt werden, dass asynchrone Aktivierung einiger Domänen effektiver bei der Erzeugung eines Aktionspotentials ist als die synchrone Eingabe. Inwieweit das PE1-Neuron damit eine Funktion zur Erkennung der zeitlichen Varianz der Aktivierung hat, wird weiterhin untersucht.

Eine weitere Teilaufgabe der Modellierung des PE1-Neurons beschäftigte sich mit der Entwicklung eines Kompartimentmodells, das konkrete elektrophysiologische Eigenschaften des PE1-Neurons reproduziert, um die Funktionsweise zu verstehen. Das Modell reproduziert die Antworteigenschaften des PE1-Neurons bis auf die experimentell beobachtete Frequenzadaptation, die wahrscheinlich auf zusätzliche, bisher nicht beschriebene Leitfähigkeiten zurückzuführen ist (siehe Abbildung 2.27b).

Landschaftsvisualisierung

Bearbeitet von: Philip Paar, Andreas Wendleder, Malte Clasen, Liviu Coconu, Hans-Christian Hege

Kooperationspartner: Armin Werner, Wieland Röhrich (Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF), Müncheberg); Oliver Deussen, Carsten Colditz (Institut für Computergrafik und Medieninformatik, Universität Konstanz); 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)

Lenné3D ist ein Forschungsverbundvorhaben in den Bereichen Computergrafik, Landschaftsmodellierung und Landschaftsvisualisierung. Seit Mai 2002 entwickelt das Projekt ein System zur interaktiven 3D-Landschaftsvisualisierung aus Spaziergängerperspektive und Kartensicht. Mit Lenné3D sollen Bürgerbeteiligungen und Entscheidungsprozesse insbesondere in der Landschaftsplanung unterstützt werden. Im Rahmen der 3jährigen Projektlaufzeit liegt

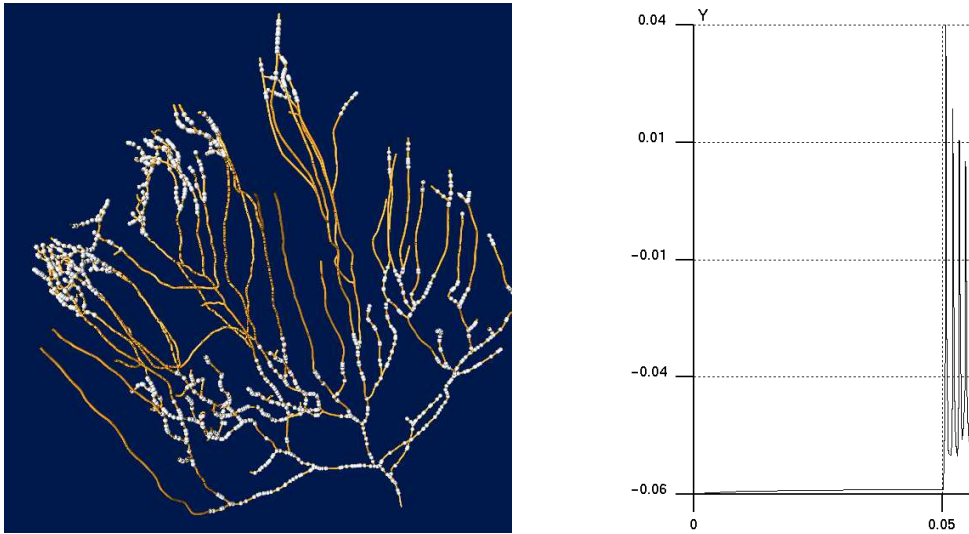


ABBILDUNG 2.27: **A** Rekonstruktion des Dendritenbaums des PE1-Neurons. Innerhalb der bekannten Domänen wurden Synapsen, dargestellt durch kleine, weiße Kugeln, verteilt. **B** Vom Modell reproduziertes Burst-Verhalten des PE1-Neurons. (In Kooperation mit B. Grünwald und J. Rybak, Neurobiologie, FU-Berlin)



ABBILDUNG 2.28: Echtzeitdarstellung des Parks Sanssouci auf der Ausstellung “Preussisch Grün – Vom königlichen Hofgärtner zum Gartendenkmalpfleger”.

der Schwerpunkt auf Vegetationsdarstellung, GIS-Daten und interaktivem Explorieren und Editieren von räumlichen Daten.

Am ZIB werden im wesentlichen drei Ziele verfolgt: die Entwicklung (a) eines Software-basierten High-Quality-Renderers mit globalem Beleuchtungsmodell, (b) eines schnellen, GPU-basierten Renderers mit deutlich verbessertem Beleuchtungsmodell als bisher inter-



ABBILDUNG 2.29: Links: Eine Gruppe Besucher im Schloss Glienicke folgt der Vorführung. Rechts: Das Interface zur Steuerung des interaktiven Spaziergangs.

aktiv möglich und (c) eines nicht-photorealistischen Renderers für skizzenhafte Darstellungen. Daneben wurde im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Hasso-Plattner-Institut die Kopplung mit dem Softwaresystem LandExplorer weiter ausgebaut. Zusätzlich zu der bereits existierenden Synchronisierung der Ansichten auf verteilten Rechnern wurde die Bearbeitung von Szenen im Netz implementiert. So ist es nun zum Beispiel möglich, Bäume im Karteneditor zu pflanzen und zu positionieren und gleichzeitig eine photorealistische Ansicht der Szene in Echtzeit zu betrachten.

Ein weiterer Bestandteil der Arbeit war die Erprobung des Systems unter realitätsnahen Bedingungen und dessen Verfeinerung, basierend auf der Reaktion von Landschaftsarchitekten und Laien. Die erste Erprobung des Lenné3D-Systems erfolgte im Rahmen des Entwicklungs- und Erprobungsvorhabens “Interaktiver Landschaftsplan Stadt Königslutter am Elm” (gefördert vom Bundesamt für Naturschutz, BfN). Lenné3D visualisierte den Ist-Zustand und Szenarien der Landschaftsentwicklung für den Nördlichen Elmhänge. Ziel der Kooperation war die Erprobung des Systems unter realen Bedingungen einer partizipativen Landschaftsplanung sowie eine Evaluation dieser Praxisanwendungen im Rahmen einer Begleitforschung.

Weiterhin war Lenné3D auf dem FutureMarket der CeBIT unter dem Motto “Die Realität ist nicht genug – 3D-Landschaften auf der CeBIT 2004” zu sehen. Nach einer Meldung auf Deutschlands meistgelesenstem Newsticker (www.heise.de), stieg das Interesse sprunghaft. Gezeigt wurden Szenen von Königslutter mit einer räumlichen Ausdehnung von 6.000 Metern, die Kopplung von Editor und Player sowie Stereoansichten, die im Vorfeld erzeugt wurden.

Als einen Höhepunkt der Ausstellung “Preußisch Grün” präsentierte die Stiftung in Kooperation mit dem Forschungsprojekt Lenné3D eine 180-Grad-Panoramaprojektion des ehemaligen Italienischen Kulturstücks von Peter Joseph Lenné (siehe Abbildungen 2.28, 2.29). Mit über 20.000 Besuchern war die Ausstellung der Stiftung Preußischer Schlösser und Gärten die bisher erfolgreichste in der Geschichte der Stiftung.

Publikationen

- [1] W. Benger. *Visualization of General Relativistic Tensor Fields via a Fiber Bundle Data Model*, Dissertation, FU Berlin und ZIB, Aug. 2004 (eingereicht).
- [2] W. Benger, H.-C. Hege. *Tensor splats*, Conference on Visualization and Data Analysis 2004 (Erbacher, Chen, Roberts, Gröhn, and Börner, eds.), Proc. of SPIE Vol. 5295, IS&T/SPIE Electronic Imaging Symposium 2004, pp. 151–162.
- [3] W. Benger, H. Bartsch, H.-C. Hege, H. Kitzler, A. Shumilina, A. Werner. *Visualizing Neuronal Structures in the Human Brain via Diffusion Tensor MRI*, International Journal of Neuroscience (accepted for publication).
- [4] A. Mojsilovic, J. Kovacevic, R. J. Safranek J. Hu, K. Ganapathy. *Matching and retrieval based on the vocabulary and grammar of color patterns*, IEEE Trans. on Image Processing, 9(1), pp. 38–54, 2000.
- [5] D. Sujudi, R. Haimes. *Identification of swirling flow in 3d vector fields*, Department of Aeronautics and Astronautics, MIT (1995), AIAA Paper 95-1715
- [6] J. Sahner, T. Weinkauff, H.-C. Hege. *Galilei Invariant Extraction and Iconic Representation of Vortex Core Line*, EuroVis 2005 (accepted for publication)
- [7] H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel. *Stream line and path line oriented topology for 2D time-dependent vector fields*. In Proc. IEEE Visualization 2004, pp. 321–328.
- [8] H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel. *Grid-independent detection of closed stream lines in 2D vector fields*. In Proc. Vision, Modeling and Visualization 2004, pp. 421–428.
- [9] T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege, H.-P. Seidel. *Boundary switch connectors for topological visualization of complex 3D vector fields*. In Data Visualization 2004. (Proc. VisSym 04), pp. 183–192.
- [10] T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege, H.-P. Seidel. *Topological construction and visualization of higher order 3D vector fields*. Computer Graphics Forum (Eurographics 2004) 23:3, pp. 469–478, 2004.
- [11] J. Rekittke, P. Paar, L. Coconu. *Dogma 3D. Grundsätze der non-photorealistischen Landschaftsvisualisierung*. In: Stadt+Grün, 7, Patzer, Berlin-Hannover, pp. 15–21, 2004.
- [12] A. Neumann, P. Paar. *Tools für innovative Planungsverfahren, Naturschutz und Landschaftsplanung*. 3, Ulmer, pp. 91–92, 2004
- [13] P. Paar, O. Schroth, U. Wissen, E. Lange, W.A. Schmid. *Steckt der Teufel im Detail? Eignung unterschiedlicher Detailgrade von 3D-Landschaftsvisualisierung für Bürgerbeteiligung und Entscheidungsunterstützung*. CORP 2004, TU Wien, pp. 535–541, 2004.

2.2.6 Geometrische Formanalyse

Geometrische Formanalyse ist ein neuer Schwerpunkt am ZIB, der im Jahr 2004 ins Leben gerufen wurde. Arbeitsziel dieses Schwerpunktes ist es, Methoden der angewandten Geometrie mit denen der Numerik zu vereinigen und zu industriell verwertbaren Anwendungen zu führen. Diese *Arbeit an Schnittstellen der Mathematik* begründet sich auf einem klaren Trend der letzten Jahre: die Numerik digitaler Flächen rückt zunehmend in den Blick industriellen Interesses: bei der Erstellung von Class-A Flächen im Automobildesign, bei der Kompression gigantischer CAD-Modelle, sowie bei der automatischen Formerkennung in der Medizin. Fortschritt ist hier undenkbar ohne ein Verständnis von Krümmungsoperatoren diskreter Flächen einerseits und einer Numerik schneller Löser für diese Operatoren andererseits. Dies ist die Schnittstelle, an welcher der Schwerpunkt "Geometrische Formanalyse" ansetzt.

Anisotropes Flächenglätten – Anwendungen im CAD

Bearbeitet von: Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Eike Preuß

Kooperationspartner: Tebis AG, München

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F4, Tebis AG

Die automatische Transformation einer gegebenen Fläche in eine *Class-A* Fläche unter räumlichen Nebenbedingungen ist derzeit eine der größten Herausforderungen im Bereich des Computer Aided Geometric Design (CAD). Bedingt durch Genauigkeitsprobleme im Prozess der Erzeugung digitaler Kurven und Flächen, ist "noise" ein omnipräsenter Artefakt. Insbesondere Flächen, die mithilfe von Digitalscannern generiert wurden, weisen oftmals inakzeptable, hochfrequente Störungen auf. Die gezielte Glättung dieser Störungen, ohne gleichzeitigen Verlust wesentlicher Detailinformationen, ist von außerordentlichem Interesse für industrielle Anwendungen im *Reverse Engineering*.

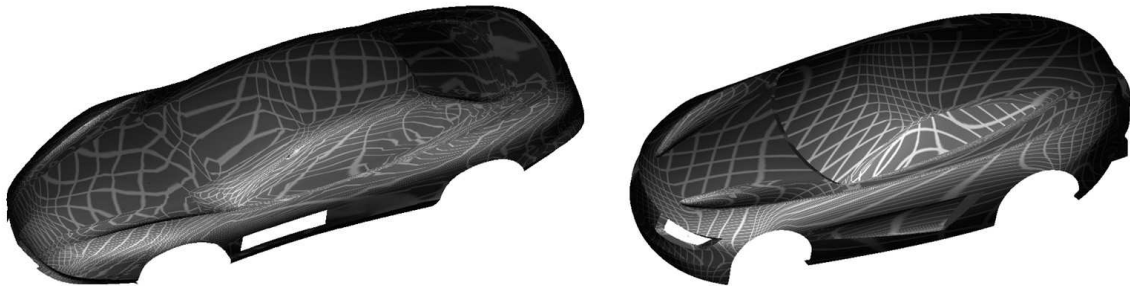


ABBILDUNG 2.30: Vergleich unterschiedlicher Oberflächenqualitäten im Automobil Design (images courtesy of Tebis AG).

In Zusammenarbeit mit der Tebis AG (München) ist es das Hauptanliegen dieses Projektes, industriell verwertbare Algorithmen zum Feature-erhaltenden Glätten von Kurven und Flächen im Automobildesign zu erforschen und zur Anwendung zu bringen. Insbesondere steht hierbei das anisotrope Kurven- und Flächenglätten unter räumlichen Nebenbedingungen im Mittelpunkt, da es bei der Konstruktion passgenauer Bauteile unerlässlich ist, dass das geglättete Resultat nur um einen exakt vorgeschriebenen räumlichen Fehler vom gescannten Modell abweichen darf. Seit Mitte des Jahres 2004 finanziert die Tebis AG einen wissenschaftlichen Mitarbeiter innerhalb des Projektes.

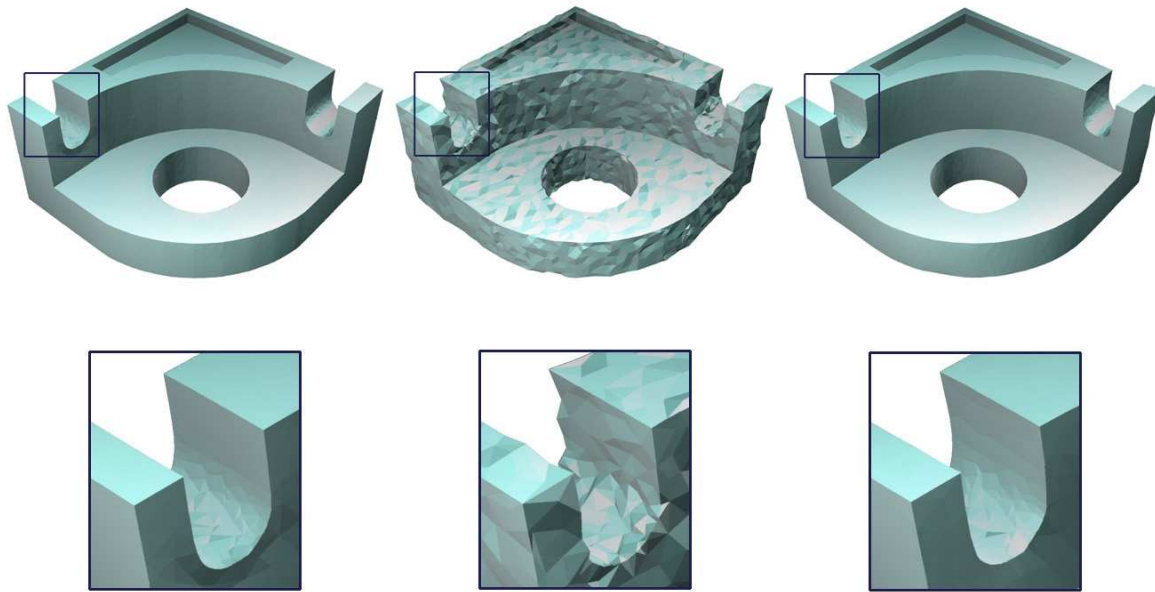


ABBILDUNG 2.31: Anisotropes Glätten einer diskreten Fläche mithilfe unseres Verfahrens eines vorgeschriebenen mittleren Krümmungsflusses: Original - Verrauschte Geometrie - Geglättetes Resultat.

Die mathematischen Methoden, die bei der Lösung dieser Probleme zum Einsatz kommen, basieren auf einer Variante des vorgeschriebenen mittleren Krümmungsflusses [3]. Dazu wurden in diesem Projekt eine Theorie von Krümmungsoperatoren auf diskreten Flächen zusammen mit einer Numerik schneller Löser für Diffusionsprobleme dieser Operatoren entwickelt. Die theoretischen Beiträge, die diesbezüglich innerhalb des Projektes im letzten Jahr entwickelt worden sind, wurden mit dem renomierten IBM Award "Eurographics Best Student Paper" geehrt. Die Ausweitung und Präzisierung dieser Theorien ist Bestandteil zweier Dissertationen, die derzeit innerhalb des Projektes angefertigt werden. In Zukunft wird das Flächenglätten durch das automatische Generieren von Patch-Layouts auf diskreten Flächen ergänzt werden.

Kompression digitaler Flächen

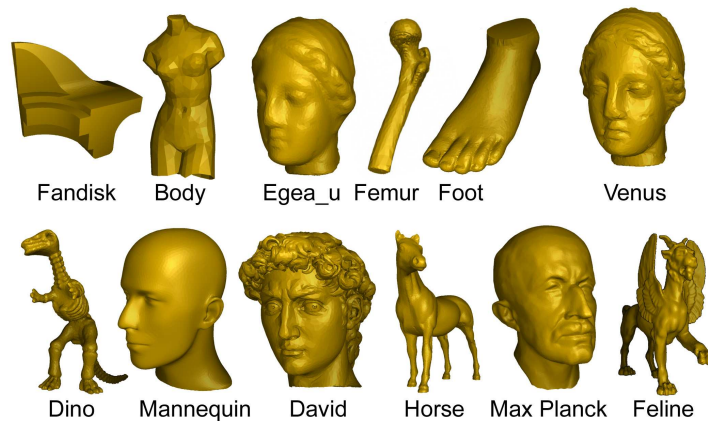
Bearbeitet von: Konrad Polthier, Matthias Nieser, Ulrich Reitebuch, Max Wardetzky

Kooperationspartner: mental images GmbH, Berlin

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F4, mental images GmbH

Digitale Flächenmodelle, die aus Millionen von Dreiecken bestehen, stehen heutzutage auf der Tagesordnung sowohl der Computergrafik- als auch der CAD-(Computer Aided Geometric Design) Industrie. Die Forderung nach immer größerem geometrischen Detail setzt dabei den Trend zu noch komplexeren Modellen fort. Auf der anderen Seite stößt dieser Trend an die Grenzen des physischen Speichers üblicher Computersysteme sowie an Grenzen der Übertragungsraten im Netz. Ziel dieses Projektes ist es mithin, im Hinblick auf Anwendungen für externe Speicherung großer Datenmengen, einer effizienten Übertragung solcher Daten im Netz sowie in-memory Speicherreduktion, neue Methoden zur *verlustfreien, speichereffizienten Darstellung* digitaler Flächen zu entwickeln und zur industriellen Anwendung

zu bringen. Diesbezüglich wurde im Jahr 2004 eine Zusammenarbeit mit der renommierten Computergrafik-Firma mental images GmbH, Berlin aufgebaut und eine Implementierung der in diesem Projekt entwickelten Ideen in Produkte dieser Firma vorgenommen. Die Firma mental images finanzierte hierzu zwei studentische Mitarbeiter innerhalb des Projektes.



<i>model</i>	vertices	FL	vs VD	vs AA
body	711	1.90	20%	3%
femur	3,897	2.11	22%	n/a
egea_u	5,315	0.54	67%	33%
fandisk	6,475	0.74	27%	n/a
venus	8,268	1.73	36%	12%
foot	10,016	1.34	39%	14%
mannequin	11,706	0.38	-2%	n/a
dino	14,070	1.44	36%	15%
horse	19,851	0.96	57%	29%
David	24,085	1.98	22%	n/a
Max	25,445	1.19	47%	18%
feline	49,864	1.23	48%	18%

ABBILDUNG 2.32: Kompressionsraten (in Bits pro Vertex) für die Kodierung der Kombinatorik von Benchmark Modellen mit Hilfe unseres FreeLence (FL) Algorithmus. Zum Vergleich die Verbesserungen gegenüber anderen state-of-the-art Algorithmen: Alliez-Desbrun's Valence-Driven (VD) sowie Lee-Alliez-Desbrun's AngleAnalyzer (AA).

Im Mittelpunkt der mathematischen Analyse steht die folgende Fragestellung: Was ist das Minimum an Information, welches zur exakten Rekonstruktion einer 3D-Fläche benötigt wird? Dabei wird das informationstechnische Interplay zwischen der Information, die in der *Kombinatorik* und solcher, die in der *Geometrie* digitaler Flächen enthalten ist berücksichtigt, um Redundanzen zu vermeiden. Ein in diesem Projekt entwickelter Ansatz bedient sich dabei geometrischer Information, um kombinatorische Information besser vorhersagen zu können. Das auf diesem Ansatz basierende Verfahren [4] weist dann Kompressionsraten auf, welche state-of-the-art single-resolution Verfahren im Schnitt um 30% verbessern (siehe Abbildung 2.32). Ein zukünftiges Ziel dieses Projektes ist es, individuelle Kompressionsalgorithmen für spezifische Gitterklassen zu entwerfen – basierend auf der Beobachtung, dass beispielsweise Flächen, die mit Hilfe von Subdivisionsverfahren erzeugt wurden, anderen optimalen Kompressionsmustern genügen, als Flächen, die mit Hilfe von CAD Systemen produziert wurden. Insbesondere

wird die Zusammenarbeit mit der mental images GmbH dahingehend ausgebaut, dass eine sinnvolle Zerlegung digitaler Flächen in elementare Regionen untersucht wird, etwa durch Schnitte entlang von Features.

Geometriebasierter Formvergleich

Bearbeitet von: Hans Lamecker, Britta Weber, Philipp Beckmann, Hans-Christian Hege, Konrad Polthier, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: Martin Seebass (Mercury Computer Systems), Peter Wust, Johanna Gellermann (Klinik für Strahlentherapie, Charité, Universitätsmedizin Berlin), Thomas Lange, Peter Schlag (Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin), Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler (AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Universitätsmedizin Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Der Vergleich dreidimensionaler Formen spielt in vielen Disziplinen, wie z.B. der Computergrafik, industriellen Prüfverfahren bis hin zur Bildanalyse (siehe S. 52) und der Medizin (siehe S. 43), eine wichtige Rolle. Detaillierte Analysen erfordern eine Repräsentation der Formen in einem gemeinsamen Vektorraum, dem sogenannten Shape-Space. Dazu ist es nötig, korrespondierende Punkte auf verschiedenen, zueinander homöomorphen Formen mittels einer Korrespondenzabbildung zu identifizieren.

Kriterien für eine geeignete Identifikation sind im Allgemeinen von der Anwendung abhängig. Häufig sind Verformungen jedoch nicht physikalischer Natur oder die Komplexität einer physikalischen Modellierung nicht dem Problem angemessen. Daher sollen in diesem Projekt aus fundamentalen mathematischen Prinzipien Ähnlichkeitsmaße für den Formvergleich abgeleitet werden und geeignete Methoden zur Bestimmung der Korrespondenzabbildung entwickelt werden.

Zunächst wurden dazu die Flächen konsistent in Regionen zerlegt, die homöomorph zur Kreisscheibe sind. Diese wurden dann konform auf ein gemeinsames Basisgebiet abgebildet [9]. Die Zusammensetzung dieser Parametrisierungen liefert einen Startwert für die Korrespondenzabbildung.

Im Berichtszeitraum wurde ein Funktional gefunden, dass die Ähnlichkeit zweier Formen auf Basis rein geometrischer Überlegungen bewertet. Es ist motiviert durch die Charakterisierung von Flächen durch das Fundamentaltheorem der Flächentheorie, welches besagt, dass eine Fläche durch ihre erste und zweite Fundamentalform sowie zusätzlichen Integrierbarkeitsbedingungen eindeutig gegeben ist. In das Funktional gehen somit im Wesentlichen zwei Terme ein: ein Term misst die metrische Verzerrung der Korrespondenzabbildung, der andere den Unterschied in den Normalkrümmungen. Die gefundene Konstruktion erfüllt die gewünschten Eigenschaften der Invarianz gegenüber euklidischen Transformationen sowie globaler Skalierung der Flächen. Zur Minimierung des Funktionals wird ein Multigrid-Verfahren entwickelt.

Diskrete Flächen und Krümmungsoperatoren

Bearbeitet von: Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Max Wardetzky

Kooperationspartner: David Hoffmann (MSRI, USA), Ralf Kornhuber (FU Berlin), Alexander Bobenko (TU Berlin), Günter Ziegler (TU Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F4

Das relativ junge Gebiet “Diskrete Differentialgeometrie” ist ein systematischer Ansatz zum Studium gekrümmter polyedrischer Flächen in Analogie zur klassischen Theorie glatter Flächen. Mit dem Aufkommen numerischer Simulationen im Umfeld der Computergrafik Ende der neunziger Jahre, ging ein Boom in der Entwicklung neuer Finite-Element-Methoden auf gekrümmten diskreten Flächen einher. Ziel dieses Projektes ist es, eine einheitliche Theorie diskreter Operatoren (weiter) zu entwickeln, die an der Schnittstelle zwischen Numerik und klassischer Differentialgeometrie liegt. Auf der einen Seite steht dabei das praktische Interesse an robusten Algorithmen, die sich *diskreter Differentialoperatoren* bedienen. Solche Algorithmen sind in weiten Bereichen industrieller Anwendungen von Bedeutung: anisotropes Glätten von 3D-Scan Daten für das CAD und in der Bildverarbeitung, Erzeugung von Patch-Layouts für das Reverse Engineering, Vergleich von Formen in der medizinischen Datenverarbeitung, und nicht zuletzt Parametrisierung diskreter Flächen zur Texturierung in der Filmindustrie.

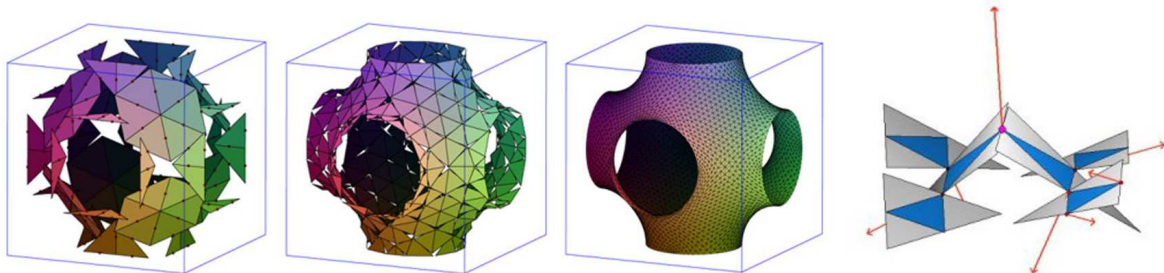


ABBILDUNG 2.33: *Links:* Nicht-konforme diskrete Minimalflächen aus einem nicht-konformen Gitter, die gegen die klassische Schwarz-P-Fläche konvergieren. *Rechts:* Mittlerer Krümmungsvektor für ein nicht-konformes Gitter.

Auf der theoretischen Seite steht einerseits die Untersuchung von Konvergenz diskreter Operatoren in Finite-Element-Methoden. Solche Konvergenzaussagen sind von wesentlicher Bedeutung, da nur sie die gesamte diskrete Theorie auf ein sicheres Fundament zu stellen vermögen und gleichzeitig Aussagen über die Konvergenzgeschwindigkeit numerischer Verfahren liefern. Für einen Großteil relevanter diskreter Operatoren, wie der mittleren Krümmung und des Laplace-Beltrami Operators, wurden solche Konvergenzaussagen innerhalb des Projektes bereits erzielt (siehe Abbildung 2.33) [8]. Zukünftige Untersuchungen werden sich mit einer Ausweitung dieser Resultate auf weitere Operatoren, wie den Shape-Operator zu beschäftigen haben. Auf der anderen Seite steht die Untersuchung diskreter Flächen mit spezifischen Krümmungseigenschaften, vgl. [6]: Von der Entdeckung neuer diskreter Minimalflächen höheren Geschlechtes, über die Beschreibung instabiler diskreter Flächen konstanter mittlerer Krümmung sowie einer Analyse diskreter Vektorfelder [7] erstrecken sich die Untersuchungen bis hin zum Studium von Punktwolken [5], welche keine a-priori Mannigfaltigkeitsstruktur besitzen.

DAAD-Projekt “Multimedia Technology for Mathematics and Computer Science Education” (Peter Deuffhard, Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Max Wardetzky; Kooperation: DAAD)

Dieses Projekt ist eine Kooperation zwischen dem ZIB, den mathematischen Fakultäten der FU Berlin und der TU Berlin mit den mathematischen Fakultäten der Universität Belgrad, der Serbischen Akademie der Wissenschaften, der Universität Nis, der Technischen Universität Sofia und der Technischen Universität Budapest. Hauptschwerpunkte dieser Kooperationen sind:

- Wissenstransfer auf dem Gebiet der Multimedia Technologie in Ausbildung und Forschung auf dem Gebiet der Mathematik und Informatik.
- Aufbau von lokalen Kompetenzzentren für Multimedia Technologien und deren Vernetzung.
- Entwicklung und Anwendung neuer multimedialer Inhalte in der Mathematik- und Informatikausbildung.

Publikationen

- [1] Hans-Christian Hege, Konrad Polthier, editors. *Visualization and Mathematics III*. Springer Verlag, Heidelberg, 2003.
- [2] Hans-Christian Hege, Konrad Polthier. *Mathematical Visualization*. Special Section of IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics. IEEE Computer Society, 2004.
- [3] Klaus Hildebrandt, Konrad Polthier. Anisotropic filtering of non-linear surface features. *Computer Graphics Forum*, 23(3):391–400, 2004.
- [4] Felix Kälberer, Konrad Polthier, Ulrich Reitebuch, Max Wardetzky. FreeLence – Compressing Triangle Meshes using Geometric Information. Report 04-26, ZIB, 2004.
- [5] Carsten Lange, Konrad Polthier. Anisotropic fairing of point sets. *Special Issue of CAGD*, to appear 2005.
- [6] Konrad Polthier. Computational aspects of discrete minimal surfaces. In Joel Hass, David Hoffman, Arthur Jaffe, Harold Rosenberg, Richard Schoen, M. Wolf, editors, *Global Theory of Minimal Surfaces*. AMS, to appear 2005.
- [7] Konrad Polthier, Eike Preuss. Identifying vector field singularities using a discrete Hodge decomposition. In Hans-Christian Hege, Konrad Polthier, editors, *Visualization and Mathematics III*, pages 113–134. Springer Verlag, 2003.
- [8] Max Wardetzky. Convergence of the cotan formula - An overview. to appear 2005.
- [9] Hans Lamecker, Martin Seebass, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, *A 3D Statistical Shape Model of the Pelvic Bone For Segmentation*, Proc. of SPIE - Volume 5370 Medical Imaging 2004: Image Processing (J.M. Fitzpatrick, M. Sonka, eds.), May 2004 pp. 1341-1351.

2.2.7 Nichtlineare Optimierung und Steuerung

Nichtlineare Ansätze verfolgen wir zur Steuerung komplexer Systeme mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Bei funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden und im Projekt zur Steuerung der Lastverteilung in Gasnetzen ist die adäquate Behandlung der Differentialgleichungen wesentlich. Charakteristisch für das letztgenannte Projekt sowie für das Projekt mit den Berliner Wasserbetrieben ist die zusätzliche Komplexität, die das jeweilige Versorgungsnetz verursacht.

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. Bei der Optimierung in Versorgungsnetzen erreichen wir dies durch rekursive Algorithmen bzgl. der Zeit, die mit Sparse-Solvern zur Ausnutzung der Netztopologie gekoppelt werden, bei funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden durch einen inexakten Newton-Pfadverfolgungsalgorithmus mit adaptiver Mehrgitter-Methode in der innersten Schleife. Ein neuer Aspekt ist die Behandlung nichtkonvexer Probleme.

Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden

Bearbeitet von: Martin Weiser, Anton Schiela, Tobias Gänzler, Peter Deuffhard

Kooperationspartner: F. Tröltzsch, U. Prüfert (TU Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1

Die im vorangegangenen Jahr begonnene Übertragung der funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden (IPM) auf elliptische partielle Differentialgleichungen wurde im Berichtszeitraum erfolgreich fortgesetzt. Zunächst konnte die lineare Konvergenz primal-dualer IPM gezeigt und eine adaptive Implementierung des inexakten Pfadverfolgungsalgorithmus erstellt werden [10]. Da jedoch die Ränder der aktiven Mengen im allgemeinen nicht im Grobgitter darstellbar sind, treibt die erforderliche Gitterverfeinerung die Anzahl der Variablen schnell in die Höhe.

Ausgehend von einer Idee von HINZE (*A variational discretization concept in control constrained optimization: the linear-quadratic case*, Comput. Optim. Appl. **30** (2005), 45–63) wurde ein *steuerungsreduziertes* Innere-Punkte-Verfahren entwickelt. Dies ist eine primale IPM, bei der die Steuerung punktweise aus den Optimalitätsbedingungen eliminiert wird, so dass nur noch der Zustand und der adjungierte Zustand als Variablen in der Homotopie auftreten. Da diese als Lösungen elliptischer Randwertprobleme deutlich glatter als die Steuerung sind, können auch auf relativ groben Gittern schon hohe Genauigkeiten erzielt werden. Insbesondere werden durch die implizite Darstellung der Steuerung die Ränder der aktiven Mengen wesentlich genauer erfasst, als es eine Gitterdarstellung ermöglichen würde (vgl. Abbildung 2.34). Weiterhin wurden Untersuchungen zur Konvergenzgeschwindigkeit der steuerungsreduzierten IPM begonnen, die auf eine superlineare Konvergenz schließen lassen. Dies schließt eine Lücke zu endlichdimensionalen IPM, für die superlineare Konvergenz gezeigt werden kann.

Sehr viel schwieriger als Steuerungsbeschränkungen sind Zustandsbeschränkungen zu behandeln. In bestimmten Fällen können Zustandsbeschränkungen durch eine Lavrentiev-Regularisierung in gemischte Zustands-Steuerungs-Beschränkungen überführt werden. Diese wiederum führen auf reguläre Lagrange-Multiplikatoren und können mit den Techniken für reine Steuerungsbeschränkungen behandelt werden [7]. Dabei bleibt der Einfluss des

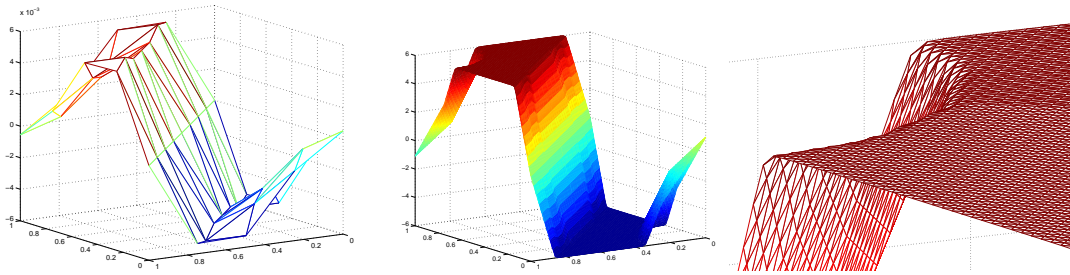


ABBILDUNG 2.34: Adjungierter Zustand λ (links) und daraus berechnete Steuerung u (mittig, Ausschnitt: rechts) auf sehr grobem Gitter. Durch die punktweise Berechnung kann die Steuerung sehr viel genauer erfasst werden, als es bei einer Darstellung auf dem groben Gitter möglich wäre.

Lavrentiev-Regularisierungsparameters und seine algorithmische Einbettung in die IPM noch zu untersuchen.

Nichtkonvexe Optimierung

Bearbeitet von: Martin Weiser, Peter Deuffhard, Bodo Erdmann

In der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie (vgl. Kapitel 2.2.3) ist das zu erwartende postoperative Erscheinungsbild des Patienten ein wesentliches Kriterium zur Beurteilung verschiedener Therapievarianten. Die bisher überwiegend verwendeten linear-elastischen Weichgewebemodelle sind jedoch nur für kleine Verzerrungen zu rechtfertigen. So führen die im Weichgewebe auftretenden großen Verzerrungen häufig zu einer physikalisch unzulässigen Selbstdurchdringung der Lösung.

Für große Verzerrungen muss daher sowohl die geometrische Nichtlinearität als auch die Nichtlinearität des Materialverhaltens berücksichtigt werden. Dies führt jedoch zwangsläufig zu einer nichtkonvexen Energielandschaft, deren Minima die stabilen Konfigurationen beschreiben. Für solche nichtkonvexen Minimierungsprobleme ist das Newtonverfahren nicht direkt verwendbar, da die Newtonrichtung sogar eine Anstiegsrichtung sein kann.

Im Berichtszeitraum wurden die affin-konjugierten Newtonverfahren aus [2] unter Hinzunahme von Ideen aus der nichtlinearen Optimierung (A.R. Conn, N.I.M. Gould, and P.L. Toint, *Trust-region methods*, SIAM, 2000) auf nichtkonvexe Probleme erweitert [9]. Ein gemeinsamer theoretischer und algorithmischer Rahmen gestattet die Beschreibung verschiedener algorithmischer Varianten, die an Beispielen der nichtlinearen Elastomechanik getestet wurden (vgl. Abbildung 2.35).

Nichtlineare Optimierung der Lastverteilung in Gasnetzen

Bearbeitet von: 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“ (beendet)

Ziel des Projektes ist die optimale operative Planung der Lastverteilung in Erdgas-Leitungsnetzen zur Deckung des aktuellen Bedarfs unter Beachtung technischer und vertraglicher Re-



ABBILDUNG 2.35: Auslenkung eines prismatischen Stabes durch axiale Verschiebung. Links: lineare Elastomechanik. Mitte: geometrische Nichtlinearität. Rechts: kompressibles Ogden-Material.

striktionen. 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 wurden während der Förderperiode (2001–2003) gemeinsam mit den industriellen Verbundpartnern Ruhrgas AG und PSI AG die nichtlinearen Modellkomponenten sowie geeignete Vereinfachungen untersucht und es wurden für den Fall fixierter Schaltvariablen strukturangepasste Optimierungsalgorithmen entwickelt und implementiert [4, 3].

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 die Ausnutzung der zeitlichen und räumlichen Struktur (Netztopologie) für SQP- und Innere-Punkt-Methoden weiterentwickelt, wodurch insbesondere für praktisch relevante (feine) Zeitdiskretisierungen eine enorme Reduktion der Rechenzeit erzielt wird [8]. Mathematisch beruht dies auf lokalen Projektionen in den Nullraum des diskretisierten Zustands- und Steuerungsoperators in jedem Zeitschritt, gefolgt von einer Rekursion über die Zeit zur Lösung des projizierten Gesamtsystems.

Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung

Bearbeitet von: Bernd Gnädig, Marc Steinbach

Kooperationspartner: Berliner Wasserbetriebe; ABB Utilities GmbH (Mannheim)

Förderung: ABB Utilities GmbH (Mannheim)

Die Berliner Wasserbetriebe (BWB) führen täglich eine Bedarfsprognose für jede Stunde des nächsten Tages durch und nehmen auf dieser Basis eine Vorausplanung des Netzbetriebs vor. Stellgrößen hierbei sind die Fördermengen von Rohwasser und Reinwasser in den Wasserwerken und Pumpwerken, die Pumpendrucke, die Tankfüllstände und die Stellungen der Schieber. Diese sollen zu einer gegebenen Bedarfsprognose so festgelegt werden, dass die variablen Kosten minimiert werden und sichergestellt ist, dass alle Verbraucher die benötigte Wassermenge mit ausreichendem Druck erhalten. Zusätzlich sind verschiedene technische, physikalische, hygienische und vertragliche Einschränkungen zu berücksichtigen. Die variablen Kosten bestehen aus den Energiekosten zur Förderung und Aufbereitung des Wassers und den Kosten für Betriebsmittel und Grundwasserentnahme.

Projektziel war die Entwicklung eines Optimierungsmoduls und dessen Implementierung unter GAMS zur Einbindung in das neue Betriebsleitsystem der Berliner Wasserbetriebe. Dies erfolgte in Zusammenarbeit mit der ABB Utilities GmbH, für die zwei vertrauliche Studien erstellt wurden [5, 6].

Die mathematische Modellierung führt auf ein sehr großes nichtlineares Optimierungsproblem mit 1481 Netzknoten, 1935 Kanten und 24 Zeitschritten [1]. Kombinatorische Aspekte (Schalten der Pumpen, Stellung der Schieber, Vermeidung unerwünschter Pumpenwechsel) werden mittels heuristischer Techniken behandelt, da eine gemischt-ganzzahlige Optimierung derzeit nicht praktikabel ist. Entscheidend für einen ausgewogenen Kompromiss zwischen hoher Modellgenauigkeit und akzeptablen Rechenzeiten waren neben den erwähnten Heuristiken die Entwicklung automatischer Techniken zur Reduktion des Netzmodells sowie die Erzeugung geeigneter Startwerte für die nichtlineare Optimierung mittels Sequentieller Linearer Programmierung.

Im Berichtsjahr wurden die Heuristiken zur Vermeidung von Pumpenwechseln durch spezielle nichtlineare Optimierungstechniken erheblich verbessert. Die mathematischen Arbeiten und die Implementierung wurden abgeschlossen und es wurden ausgiebige Tests mit weiteren Detailanpassungen im laufenden Betrieb durchgeführt.

Publikationen

- [1] J. Burgschweiger, B. Gnädig und M. C. Steinbach, *Optimization Models for Operative Planning in Drinking Water Networks*, Report 04-48, ZIB, 2004.
- [2] P. Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algorithms*, Computational Mathematics, vol. 35, Springer, 2004.
- [3] K. Ehrhardt und M. C. Steinbach, *KKT Systems in Operative Planning for Gas Distribution Networks*, PAMM 4 (2004), 606–607.
- [4] K. Ehrhardt und M. C. Steinbach, *Nonlinear Optimization in Gas Networks*, in Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes (H. G. Bock, E. Kostina, H. X. Phu und Rolf Rannacher, Hrsg.), Springer, 2005, 139–148.

- [5] B. Gnädig und M. C. Steinbach, *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung*, ZIB, 2003. Studie für ABB Utilities GmbH, Mannheim.
- [6] B. Gnädig und M. C. Steinbach, *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung mit Gesamtnetzmodell*, ZIB, 2004. Studie für ABB Utilities GmbH, Mannheim.
- [7] U. Prüfert, F. Tröltzsch, and M. Weiser, *The convergence of an interior point method for an elliptic control problem with mixed control-state constraints*, Report 04-47, ZIB, 2004.
- [8] M. C. Steinbach, *On PDE Solution in Transient Optimization of Gas Networks*, Report 04-46, ZIB, 2004.
- [9] M. Weiser, P. Deuffhard, and B. Erdmann, *Affine conjugate adaptive Newton methods for nonlinear elastomechanics*, Report 04-01, ZIB, 2004.
- [10] M. Weiser and A. Schiela, *Function space interior point methods for PDE constrained optimization*, PAMM 4 (2004), no. 1, 43–46.

2.2.8 Diskrete Strukturen

Aus mathematischer Sicht enthalten viele kombinatorische Optimierungsaufgaben die gleichen grundlegenden Bausteine. Die Untersuchung nützlicher Eigenschaften dieser „diskreten Strukturen“ ist daher besonders wichtig. Solche Resultate kommen unmittelbar vielen anderen Fragestellungen – häufig auch Anwendungen in anderen Gebieten der Mathematik – zugute.

Im Berichtszeitraum zielten die Untersuchungen insbesondere ab auf „Stabile Mengen und Perfekte Graphen“, die „Baumweite eines Graphen“, „Polyedrische Unterteilungen“, „Triangulierte Mannigfaltigkeiten“ sowie „Topologische untere Schranken für Graphenfärbung“. Zudem gibt es zwei Projekte zur Verbreitung des Wissens über diskrete Strukturen in Schule, Universität und Industrie.

Eine Auswahl der in diesem Jahr erzielten Resultate:

- Für die Klasse der *a-perfekten Graphen* konnte gezeigt werden, dass deren Imperfektionsgrad durch $3/2$ beschränkt ist.
- Durch theoretische sowie rechnerische Studien konnte die Güte mehrerer neuer unterer Schranken für die Baumweite eines Graphen analysiert werden.
- Ein Kapitel über reguläre Triangulierungen für ein Lehrbuch zum Thema „Polyedrische Unterteilungen“ wurde weitgehend fertiggestellt.
- Es hat sich überraschenderweise gezeigt, dass alle Ecken-minimalen 10-Ecken-Triangulierungen der orientierbaren Fläche vom Geschlecht Zwei realisierbar sind.
- Die heuristischen Methoden zur Erkennung des topologischen Typs von Graphenfärbungsmannigfaltigkeiten konnten deutlich verbessert werden.
- Ein Buch für Mathematik-Lehrerinnen und -Lehrer zu klassischen Themen der kombinatorischen Optimierung (wird 2005 erscheinen).
- Ein neues Projekt „Combinatorial Optimization at Work“, in dem ein Buch für Studenten, Ingenieure sowie Hochschullehrer über Anwendungen der kombinatorischen Optimierung entstehen soll, wurde begonnen.

Stabile Mengen und perfekte Graphen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Arie Koster, Annegret Wagler

Kooperationspartner: 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 eine der wichtigsten Strukturen in der ganzzahligen Optimierung mit Anwendungen z. B. bei der ÖPNV-Dienstplanung (siehe Projekt *Umlauf- und Dienstplanung*) und gewissen Fahrzeugeinsatzplanungen [6]. 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* $\text{STAB}(G)$, der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen, aufzufassen. Die dazu nötige Beschreibung der Facettenmenge des Polytops ist für die meisten Graphenklassen allerdings nicht bekannt.

Für *perfekte Graphen* ist $\text{STAB}(G) = \text{QSTAB}(G)$, wobei $\text{QSTAB}(G)$ mittels aller Clique-Bedingungen beschrieben wird. Das Stabile-Mengen-Problem für perfekte Graphen ist in polynomialer Zeit lösbar [14], da es ein polynomiales Separationsverfahren für eine Klasse von Ungleichungen, die alle Clique-Bedingungen enthalten, gibt. Das Ziel besteht darin, durch strukturelle Untersuchungen der Stabile-Mengen-Polytope von Oberklassen perfekter Graphen die polynomiale Lösbarkeit des Stabile-Mengen-Problems für weitere Graphenklassen zu beweisen.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, den Perfektheitsbegriff zu verallgemeinern. Ein Weg ist eine polyedrische Relaxierung, welche für imperfekte Graphen G den Unterschied zwischen $\text{STAB}(G)$ und $\text{QSTAB}(G)$ untersucht. Dies kann hinsichtlich der Facettenmenge geschehen, indem man z. B. Rang-Bedingungen als verallgemeinerte Clique-Bedingungen zulässt, siehe [42]. Eine solche Klasse bilden *a-perfekte Graphen*, deren $\text{STAB}(G)$ ausschließlich durch sogenannte Antiweb-Bedingungen beschrieben werden [10]. Allgemein wird der *Imperfektheitsgrad* eines Graphen beschrieben als

$$\text{imp}(G) = \min\{t : \text{QSTAB}(G) \subseteq t \cdot \text{STAB}(G)\} \quad .$$

Ausschließlich für perfekte Graphen ist der Imperfektheitsgrad genau 1, für alle imperfekte Graphen jedoch echt größer als 1. Wir konnten für alle a-perfekten Graphen zeigen, dass deren Imperfektheitsgrad durch $3/2$ beschränkt ist. Zudem kann der Imperfektheitsgrad von Antiwebs (vgl. Abbildung 2.36) in polynomialer Zeit berechnet werden.

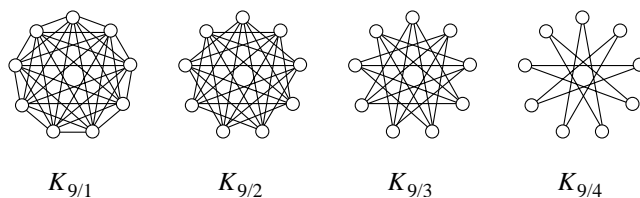


ABBILDUNG 2.36: Einige Antiwebs.

In perfekten Graphen stimmen Clique- und Färbungszahl für alle induzierten Untergraphen überein. Durch ein verallgemeinertes Färbungskonzept und die Betrachtung von Antiwebs

als verallgemeinerte Cliques können *zirkulär perfekte Graphen* als eine Oberklasse perfekter Graphen definiert werden [45]. Da zirkulär perfekte Graphen einige Klassen α -perfekter Graphen enthalten, besteht die Hoffnung, den Imperfektheitsgrad zirkulär perfekter Graphen ebenfalls durch $3/2$ beschränken zu können. Zusätzlich können das Färbungs- und das Stabile-Mengen-Problem für die unter Komplementbildung abgeschlossene Teilmenge zirkulär perfekter Graphen in polynomialer Zeit berechnet werden [11].

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

Über die Klasse der normalen Graphen ist (außer ihrer engen Beziehung zu perfekten Graphen) nicht viel bekannt. Körner und de Simone [19] vermuten, dass jeder C_5, C_7, \overline{C}_7 -freie Graph normal ist. Diese Vermutung konnte bereits für Webs und Antiwebs verifiziert werden [43].

Baumweite und Kombinatorische Optimierung

Bearbeitet von: Arie Koster

Kooperationspartner: Hans Bodlaender, Thomas Wolle (Universität Utrecht, Niederlande); Stan van Hoesel (Universität Maastricht, Niederlande)

Die *Baumweite* eines Graphen kennzeichnet das Maß seiner Ähnlichkeit zu einem Baum. Die dazugehörige optimale *Baumzerlegung* des Graphen spiegelt diese Baumstruktur wider. Viele i. a. NP-schwere kombinatorische Probleme sind auf Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomialer Zeit lösbar. In den letzten Jahren sind mehrere Studien veröffentlicht worden, die zeigen, dass diese Aussagen nicht nur theoretischen Wert haben, sondern sich auch immer besser in der Praxis einsetzen lassen [9, 20]. Eine wichtige Voraussetzung für die Verwendung dieses Konzepts ist die Verfügbarkeit einer Baumzerlegung optimaler oder nahezu optimaler Baumweite. Die meisten theoretisch effizienten Lösungen für dieses Problem sind jedoch nicht praktisch einsetzbar.

Im Berichtszeitraum standen Untersuchungen im Mittelpunkt, die darauf basieren, dass die Baumweite eines Graphen durch die Entfernung von Knoten oder Kanten sowie durch die Kontraktion zweier verbundener Knoten nicht ansteigen kann. Dies bedeutet, dass die Baumweite eines (induzierten) Teilgraphen oder Minoren eine untere Schranke für die Baumweite des Ursprungsgraphen angibt, und damit natürlich auch jede untere Schranke für die Baumweite des (induzierten) Teilgraphen oder Minoren. Da zum Beispiel der minimale Grad über alle Knoten eine untere Schranke für die Baumweite darstellt, ist das Maximum des minimalen Grades über alle Teilgraphen oder Minoren ebenfalls eine untere Schranke. In [4] haben wir gezeigt, dass insbesondere das Maximum über alle Minoren eine sehr wertvolle untere Schranke liefert, ihre Berechnung jedoch zur Klasse der NP-schweren Probleme gehört. In [21, 44] werden diese und weitere auf dem Grad der Knoten basierende untere Schranken für die Baumweite untersucht.

Eine weitere untere Schranke für die Baumweite eines Graphen stellt die sogenannte *Maximum Cardinality Search Lower Bound* (MCSLB) von Lucena [23] dar. In [3] zeigen wir, dass es NP-

schwer ist, diese Schranke zu berechnen, und entwickeln mehrere Strategien zur Bestimmung oberer und unterer Schranken für die MCSLB eines Graphen. Es stellt sich heraus, dass diese Schranke nur marginal besser ist als die vorher angesprochene Schranke des maximalen Minimalgrads. Die Berechnung der MCSLB über alle Minoren eines Graphen wird in [4] behandelt.

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 [35, 39]. 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 [36, 37]. In den Jahren 2002/2003 wurde das auf orientierten Matroiden beruhende Konzept veröffentlicht und die Laufzeitkomplexität der implementierten Algorithmen dokumentiert [34, 40]. Ferner wurde die Distribution gepflegt (Anpassung an neue Compiler-Versionen etc.).

Während eines Forschungsaufenthalts am Mathematical Sciences Research Institute Berkeley (MSRI), USA, konnte bewiesen werden, dass ein polygonales Prisma mit zyklisch vorgegebenen Diagonalen nicht ohne neue Ecken trianguliert werden kann [41]. Die Frage war bis dato überraschenderweise noch offen, und erst der nicht-triviale Beweis über den Cayley-Trick [15] zeigt, warum das so war. Das neue Resultat liefert nun eine sehr natürliche Verallgemeinerung des Schönhardt-Polyeders (Dreiecks-Prisma). Diese Arbeit ist nun zur Veröffentlichung in einem MSRI-Band akzeptiert.

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 [38]. Eine Sommer-Lehrveranstaltung für Graduierte am MSRI zum selben Thema ist auf der dortigen Webseite auf Streaming-Video zu sehen.

Im Berichtsjahr wurde am ZIB in der Hauptsache das Kapitel über reguläre Triangulierungen weitgehend fertig gestellt. Eine weitere Vorlesung über den Stoff des Buches wurde an der TU Berlin angeboten, um das Konzept zu testen.

Für das Jahr 2005 ist ein zweiwöchiger Aufenthalt der Autoren im RiP-Programm (Research in Pairs) des Forschungszentrums Oberwolfach bereits genehmigt.

Triangulierte Mannigfaltigkeiten

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Anders Björner (KTH, Stockholm, Schweden); Jürgen Bokowski (TU Darmstadt); Ulrich Brehm (TU Dresden); Michael Joswig (TU Darmstadt); 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 zugrunde liegende kombinatorische Struktur, während hierfür später zunehmend algebraische Methoden Anwendung fanden. Obgleich sich herausstellte, dass nicht jede topologische Mannigfaltigkeit triangulierbar ist, gilt aus algorithmischen Gründen den kombinatorischen Aspekten von Mannigfaltigkeiten und ihren Triangulierungen weiterhin großes Interesse. Nötig für viele Untersuchungen ist dabei, auf Triangulierungen von handhabbarem Format zugreifen zu können.

Zu diesem Zweck wurden im Rahmen des Projektes explizit Triangulierungen für größere Klassen von 3-Mannigfaltigkeiten konstruiert (siehe [2, 7, 8, 17, 27, 29, 33]). Des Weiteren konnten Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig enumeriert werden. Dies wurde beispielsweise für eckentranstive Triangulierungen auf bis zu 13 Ecken (in allen dabei möglichen Dimensionen) durchgeführt, wobei viele bekannte, aber auch einige interessante neue Beispiele entdeckt wurden [18, 24]. Das hierzu entwickelte Enumerationsprogramm konnte u. a. auch zur Enumeration aller 42426 triangulierten 2-Mannigfaltigkeiten auf 10 Ecken eingesetzt werden [33].

Es ist im Allgemeinen ein schwieriges Problem zu entscheiden, ob eine gegebene, triangulierte, orientierbare Fläche vom Geschlecht $g \geq 1$ sich im 3-dimensionalen Raum geometrisch (mit geradlinigen Kanten, ebenen Dreiecken und ohne Überschneidungen) realisieren lässt. Überraschenderweise lassen sich solche polyedrischen Realisierungen für Triangulierungen mit wenigen Ecken durch zufälliges Auswählen von Koordinaten erzielen: Alle 865 Eckenminimalen 10-Ecken-Triangulierungen der orientierbaren Fläche vom Geschlecht Zwei sind realisierbar, wobei 863 dieser Realisierungen „rein zufällig“ gefunden werden konnten [33] (siehe Abbildung 2.37).

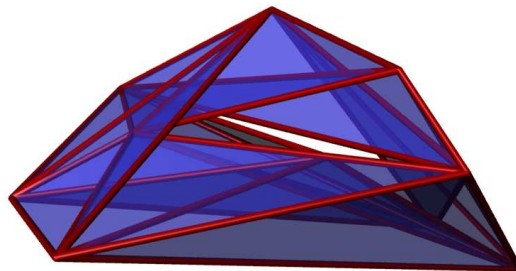


ABBILDUNG 2.37: Eine zufällig realisierte Fläche vom Geschlecht 2 mit 10 Ecken.

Für das Jahr 2005 stehen im Rahmen des Projekts mehrere Veröffentlichungen zur Fertigstellung an, insbesondere das im Berichtsjahr wesentlich vorangeschrittene Buchprojekt „Triangulated Manifolds“. Zugehörige Datensammlungen [30] sowie Kapitel über geometrische 3-Mannigfaltigkeiten [27], zentralsymmetrische Sphären und Polytope [31] und kombinatorische Mannigfaltigkeiten [32] sind bereits erhältlich.

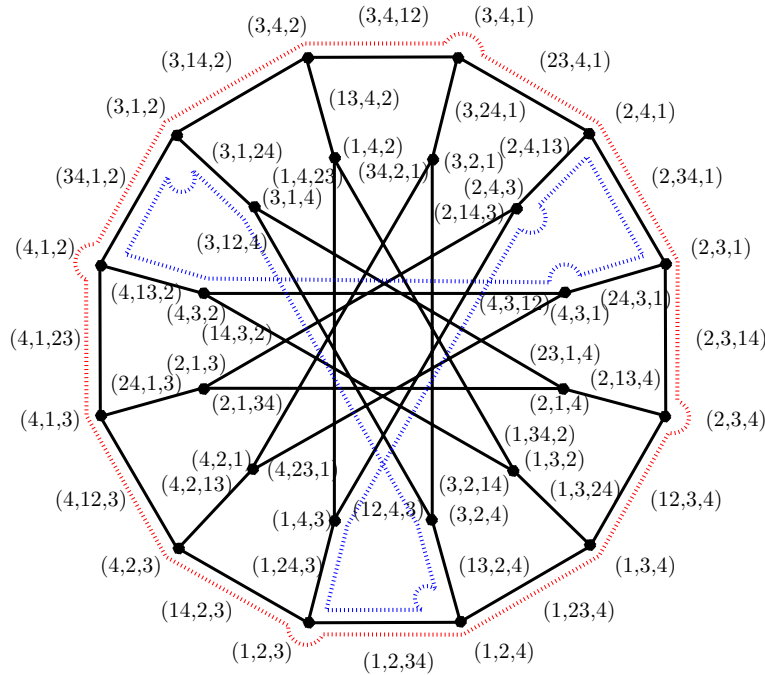


ABBILDUNG 2.38: Der Hom-Komplex $\text{Hom}(K_3, K_4)$ in $\text{Hom}(\overline{C}_7, K_4)$.

Graphenfärbungen: Topologische untere Schranken

Bearbeitet von: Frank H. Lutz

Kooperationspartner: Péter Csorba (ETH, Zürich, Schweiz)

In seinem bemerkenswerten Beweis der Kneser-Vermutung im Jahr 1978 [22] setzte Lovász erstmalig Werkzeuge der algebraischen Topologie ein, um untere Schranken für die Färbungszahl $\chi(G)$ eines Graphen G zu gewinnen. Hierbei wird dem Graphen G ein Simplizial- (oder Zell-)Komplex zugeordnet, dessen topologische Invarianten dann zur Berechnung der unteren Schranken herangezogen werden.

Computer-Berechnungen dieser Invarianten werden mittlerweile standardmäßig durchgeführt, um explizite Beispiele analysieren und verstehen zu können, mit dem Ziel, anschließend allgemeinere Vermutungen oder Sätze aufstellen zu können.

In ihrer im Jahr 2003 vorgestellten Arbeit [1] beweisen Babson und Kozlov eine Vermutung von Lovász: Ist für einen Graphen H der von Lovász eingeführte Hom-Komplex $\text{Hom}(C_{2r+1}, H)$ für ein $r \geq 1$ k -zusammenhängend, so ist $\chi(H) \geq k + 4$.

In Zusammenarbeit mit Péter Csorba konnte in diesem Projekt gezeigt werden, dass der Zellkomplex $\text{Hom}(C_5, K_{n+2})$ die Struktur eines $(n - 1)$ -Sphären-Bündels über der n -Sphäre hat [12], woraus sich in diesem Fall die topologischen Invarianten unmittelbar ableiten lassen. Zudem konnten jene Graphen G charakterisiert werden, für die die Komplexe $\text{Hom}(G, K_n)$ Mannigfaltigkeiten sind [13] (siehe beispielsweise die in Abbildung 2.38 dargestellte nicht-zusammenhängende Mannigfaltigkeit $\text{Hom}(\overline{C}_7, K_4)$). Diese *Graphenfärbungsmannigfaltigkeiten* und ihre topologischen und kombinatorischen Eigenschaften sollen weiter untersucht werden.

Im Berichtsjahr konnten hierzu die heuristischen Methoden zur Erkennung des topologischen Typs von Graphenfärbungsmannigfaltigkeiten deutlich verbessert werden. Beispielsweise konnte für einige Triangulierungen von Graphenfärbungsmannigfaltigkeiten mit mehr als 3000 Ecken und 19000 Tetraedern festgestellt werden, dass sie homöomorph zu den 3-Mannigfaltigkeiten $(S^2 \times S^1)^{\#3}$ und $(\#13T^2) \times S^1$ sind.

Diskrete Mathematik für die Schule

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Brigitte Lutz-Westphal

Kooperationspartner: Lisa Hefendehl-Hebeker (Universität Duisburg-Essen); Stephan Hußmann (Pädagogische Hochschule Freiburg); Ulrich Kortenkamp (TU Berlin); Jürg Kramer (HU Berlin); Kurt Mehlhorn (Max-Planck-Institut Saarbrücken); DFG-Forschungszentrum MATHEON; Algorithmic Solutions Software GmbH; Geschwister-Scholl-Schule Tübingen; Herder-Oberschule Berlin; Romain-Rolland-Oberschule Berlin; Wildermuth-Gymnasium Tübingen

Förderung: VolkswagenStiftung

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 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.

Das Ziel des Projekts ist, Themen der Kombinatorischen Optimierung für den Unterricht an Schulen zugänglich zu machen. Die Themen wurden im Unterricht an den Kooperationsschulen in Berlin und Tübingen bereits erprobt. Im Berichtszeitraum fand ein weiterer Unterrichtsversuch im Profilkurs Klasse 11 an der Herder-Oberschule in Berlin-Charlottenburg statt. Zudem wurden Kurse für die Deutsche Gesellschaft für das hochbegabte Kind angeboten. Im Juni 2004 wurde im Rahmen der Sommerschule „Lust auf Mathematik“ der Humboldt-Universität ein Kurs über das berühmte Traveling-Salesman-Problem durchgeführt. Bei der Arbeit mit Schülerinnen und Schülern steht stets das selbständige Entdecken und Lernen im Vordergrund.

Vorträge und Workshops für Lehrerinnen und Lehrer haben zu einem größeren Bekanntheitsgrad der Themen beigetragen, so dass etliche Lehrkräfte bereits eigenen Unterricht über Kombinatorische Optimierung durchgeführt haben. Auch die Lehrplanlandschaft beginnt sich zu ändern. Im neuen Hamburger Lehrplan gibt es Graphen und kürzeste Wege als Wahlpflichtthema, in Berlin wird derzeit über die Einführung Diskreter Mathematik in den Lehrplan nachgedacht. Im Rahmen eines SINUS-Transfer Projekts entsteht ein Konzept für den Grundkurs Mathematik in Nordrhein-Westfalen, das Kombinatorische Optimierung als einen Baustein enthalten soll.

Der Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum lag in der Konzeption, Koordination und Durchführung eines Buchprojekts [16]. Das Buch, an dem mehrere Autoren beteiligt sind, richtet sich an Lehrerinnen und Lehrer, die durch die Lektüre in den Stand versetzt werden sollen, klassische Themen der Kombinatorischen Optimierung zu unterrichten. Die Texte erfüllen eine doppelte Funktion: Sie sollen den Leser oder die Leserin dazu anleiten, sich den Stoff selbständig entdeckend zu erschließen, und gleichzeitig soll dabei ein Bild von Unterricht entstehen, der ein genetisches Lernen fördert. Das Buch wird im Jahr 2005 erscheinen.

Combinatorial Optimization at Work

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Thorsten Koch

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt G1

Bei modernen Anwendungen der Kombinatorischen Optimierung müssen vielfältige technische Details, betriebswirtschaftliche Erfordernisse und rechtliche Rahmenbedingungen berücksichtigt werden. Die mathematische Modellierung dieser Zusammenhänge ist nur anhand realer Beispiele adäquat vermittelbar. Im Hinblick auf Ausbildung und Lehre erfordert dies didaktisch aufbereitete Daten aus der Industrie und die Bereitstellung anwendungsspezifischer Software.

Combinatorial Optimization at Work wird ein »digitales Lehrbuch«, das

- Fallbeispiele aus der Praxis beschreibt,
- die auftretenden Schwierigkeiten erläutert,
- die mathematischen Modelle und Theorien diskutiert und
- den algorithmischen Lösungsweg erklärt.

Das Buch und umfangreiche Datensammlungen, Programme, Bilder und Visualisierungen werden im Internet verfügbar gemacht. Dafür werden ausgewählte Anwendungen aus den Gebieten Telekommunikation, Öffentlicher Verkehr, Mikroelektronik, Logistik und Produktionsplanung dargestellt. Das Buch soll sich an folgende Zielgruppen richten:

- *Studenten* der Mathematik, Informatik, Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften, die sich für Strategien zur Lösung von Planungs- und Optimierungsproblemen interessieren
- *Ingenieure* in der Industrie auf der Suche nach State-of-the-Art-Problemlösungsmethoden
- *Hochschullehrer*, die sorgfältig dokumentierte, reale Anwendungsprobleme der Diskreten Mathematik für die Lehre benötigen.

Das Projekt ist bereits angelaufen und erste Planungen sind abgeschlossen. Die Einwerbung von Partnern für die einzelnen Kapitel ist weit fortgeschritten und Mitarbeiter von Siemens,

Infineon, Atesio, HHLA, IntraNetz sowie der Universitäten Bayreuth, Kaiserslautern, Chemnitz, Magdeburg und der TU Berlin haben ihre Kooperationsbereitschaft erklärt.

Publikationen

- [1] E. Babson und D. N. Kozlov, *Topological obstructions to graph colorings*, Electron. Res. Announc. Amer. Math. Soc. 9, 61–68 (2003).
- [2] A. Björner und F. H. Lutz, *A 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere and non-PL spheres with few vertices*, Electronic Geometry Model No. 2003.04.001 (2003), online¹ verfügbar.
- [3] H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *On the maximum cardinality search lower bound for treewidth*, In: *Proceedings of International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, WG 2004*, Lecture Notes in Computer Science, 3353:81–92, 2004.
- [4] H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster und T. Wolle, *Contraction and treewidth lower bounds*, In: *Proceedings of 12th Annual European Symposium on Algorithms, ESA 2004*, Lecture Notes in Computer Science, 3221:628–639, 2004.
- [5] J. Bokowski, D. Bremner, F. H. Lutz und A. Martin, *Combinatorial 3-manifolds with 10 vertices*, in Vorbereitung.
- [6] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998.
- [7] U. Brehm und F. H. Lutz, *Triangulations of Seifert manifolds*, in Vorbereitung.
- [8] ———, *Triangulations of Sol manifolds*, in Vorbereitung.
- [9] W. Cook und P. D. Seymour, *Tour merging via branch-decomposition*, INFORMS Journal on Computing, 15(3):233–248, 2003.
- [10] S. Coulonges, A. Pêcher und A. Wagler, *On the imperfection ratio of a -perfect graphs*, Manuscript, 2005.
- [11] ———, *Strongly circular-perfect graphs*, Manuscript, 2005.
- [12] P. Csorba und F. H. Lutz, *Graph colorings and sphere bundles*, in Vorbereitung.
- [13] ———, *Graph coloring manifolds*, in Vorbereitung.
- [14] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, Combinatorica 1 (1981), 169–197.
- [15] B. Huber, J. Rambau und F. Santos, *Cayley embeddings, lifting subdivisions, and the Bohne-Dress theorem on zonotopal tilings*, Preprint SC 98-44, ZIB, 1999.
- [16] St. Hußmann, B. Lutz-Westphal, *Mathematik erleben - kombinatorische Optimierung lehren und lernen*, Vieweg (erscheint 2005).

¹<http://www.eg-models.de/2003.04.001>

- [17] M. Joswig und F. Lutz, *One-Point Suspensions and Wreath Products of Polytopes and Spheres*, Preprint, 17 Seiten, 2004; math.CO/0403494; erscheint in: J. Comb. Theory, Ser. A.
- [18] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Vertex-Transitive Triangulations I*, Preprint, 73 Seiten, 2004.
- [19] J. Körner und C. de Simone, *On the odd cycles of normal graphs*, Discrete Applied Mathematics 94:161–169, 1999.
- [20] 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(3):170–180, 2002.
- [21] A. M. C. A. Koster, T. Wolle und H. L. Bodlaender, *Degree-Based Treewidth Lower Bounds*, Report 04–44, ZIB, 2004.
- [22] L. Lovász, *Kneser’s conjecture, chromatic number, and homotopy*, J. Comb. Theory, Ser. A 25, 319–324 (1978).
- [23] B. Lucena, *A new lower bound for tree-width using maximum cardinality search*, SIAM Journal on Discrete Mathematics 16:345–353, 2003.
- [24] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices and Vertex-Transitive Group Actions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1999, Dissertation, TU Berlin.
- [25] ———, *A vertex-minimal non-shellable simplicial 3-ball with 9 vertices and 18 facets*, erscheint als: *Electronic Geometry Model*.
- [26] ———, *Small examples of non-constructible simplicial balls and spheres*, erscheint in: SIAM J. Discrete Math., Report 03–28, ZIB, 2003, arXiv:math.CO/0309149.
- [27] ———, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Geometric 3-Manifolds*, Report 03–36, ZIB, 2003, arXiv:math.GT/0311116.
- [28] ———, *Vertex-minimal not vertex-decomposable balls*, erscheint als: *Electronic Geometry Model*.
- [29] ———, *GAP-program SEIFERT (Version Nov/2003)*, online², 2003.
- [30] ———, *The Manifold Page*, online³, 2000–2003.
- [31] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Centrally Symmetric Spheres and Products of Spheres*, Preprint, 26 Seiten, 2004; math.MG/0404465.
- [32] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Combinatorial Manifolds*, Preprint TU Berlin, 2004.
- [33] F. H. Lutz, *Enumeration and random realization of triangulated surfaces*, Extended abstract, 10 Seiten, 2004.

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

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

- [34] J. Pfeifle und J. Rambau, *Computing triangulations using oriented matroids*, Algebra, Geometry and Software Systems (M. Joswig und N. Takayama, Hrsg.), Springer, 2003.
- [35] J. Rambau, *Projections of polytopes and polyhedral subdivisions*, Berichte aus der Mathematik, Shaker, Aachen, 1996, Dissertation, TU Berlin.
- [36] ———, *TOPCOM—Triangulations of Point Configurations and Oriented Matroids*, Software unter Gnu Public Licence, online verfügbar⁴, 1999.
- [37] ———, *Point configuration and a triangulation without flips as constructed by Santos*, Electronic Geometry Model No. 2000.08.005, 2000, online⁵ verfügbar.
- [38] ———, *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern*, Report 00–46, ZIB, 2000, Manuskript einer Vorlesung an der TU Berlin im Sommersemester 2000, online⁶ verfügbar.
- [39] ———, *Circuit admissible triangulations of oriented matroids*, Discrete & Computational Geometry **27** (2002), 155–161.
- [40] ———, *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.
- [41] ———, *On a generalization of Schönhardt’s polyhedron*, Preprint 2003-013, MSRI, 2003.
- [42] A. Wagler, *Relaxing Perfectness: Which Graphs are Almost Perfect?*, In: The Sharpest Cut – The impact of Manfred Padberg and his work, (M. Grötschel, Hrsg.), MPS-SIAM Series on Optimization, 2004.
- [43] ———, *The Normal Graph Conjecture is true for Circulants*, Report 04–06, ZIB, 2004.
- [44] T. Wolle, A. M. C. A. Koster und H. L. Bodlaender, *A note on contraction degeneracy*, Report 04–43, ZIB, 2004.
- [45] X. Zhu, *Circular perfect graphs*, erscheint in: Journal of Graph Theory.

2.2.9 Telekommunikation

Die Struktur des Telekommunikationsmarktes ändert sich in unserer Informationsgesellschaft in rasantem Tempo. Neue Dienste und Anwendungen sowie die stark steigende Zahl privater Breitband-DSL-Anschlüsse sorgen für immer höhere Anforderungen an Übertragungskapazitäten und an eine effizientere Nutzung vorhandener Ressourcen.

Aus Anbietersicht besteht dabei eine hohe Verflechtung zwischen verschiedenen Diensten, die aus Sicht des Endanwenders wenig miteinander zu tun haben. So wird z.B. ein Handygespräch ab der empfangenden Antenne in der Regel über IP oder ATM auf ein optisches Netz mit SDH- oder WDM-Technologie geführt, in dem die Daten mit hoher Geschwindigkeit zum

⁴<http://www.zib.de/rambau/TOPCOM>

⁵<http://www.eg-models.de/2000.08.005>

⁶<http://www.zib.de/PaperWeb/abstracts/ZR-00-46>

Empfänger übertragen werden können. Auch Telefongespräche aus dem Festnetz werden zunehmend über IP-Netze geroutet (Voice over IP). Letztendlich werden diese Daten zusammen mit E-Mails oder anderem Internetverkehr in dem gleichen optischen Netz übertragen.

Der scharfe Wettbewerb in der Telekommunikationsbranche erfordert einen immer stärkeren Einsatz von Optimierungsverfahren bei der Planung neuer Netze und beim Ausbau bestehender Netze. In den Telekommunikationsprojekten am ZIB wird in Zusammenarbeit mit verschiedenen Netzbetreibern die Modellierung und Lösung praktischer Netzplanungsaufgaben untersucht. Dabei decken die Projekte ein großes Spektrum von Funknetzen über IP-, ATM- und SDH-Netze bis zu optischen Netzen ab:

- Im Mobilfunkbereich ist das Projekt *Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle* angesiedelt, in dem Verfahren zur Planung von UMTS-Netzen aus dem MOMENTUM-Projekt weiterentwickelt werden. Mit dem *FAP Web* wird am ZIB eine vielgenutzte Bibliothek von veröffentlichten Szenarien und Referenzlösungen zu Frequenzzuweisungsproblemen gepflegt.
- In den Projekten *Optimale Zulassungskontrolle* und *Überlastkontrolle im Internet* werden Methoden zur effizienten Steuerung von IP-Verkehr entwickelt, um eine möglichst hohe Datenrate in einem gegebenem Netz zu erreichen und Überlastsituationen zu verhindern.
- Inhalt der Projekte *Integrierte Planung von Multi-Level/Multi-Layer-Netzwerken* ist die Entwicklung integrierter Planungsverfahren über mehrere Technologien und Hierarchieebenen hinweg. Diese und frühere Verfahren wurden in den Projekten *Betriebsoptimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)* und *Optimierung des Wissenschaftsnetzes X-WiN* zur Planung des deutschen Wissenschaftsnetzes eingesetzt. Mit dem Projekt *Optimale Kommunikationsstrukturen für dezentrale Energienetze* wurden die Methoden aus der Telekommunikationsplanung auf einen neuen Anwendungsbereich ausgedehnt, nämlich auf den Aufbau möglichst effizienter Kommunikationsstrukturen zwischen vielen Kleinanbietern erneuerbarer Energien.
- In dem Projekt *Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze* wird die optimale Planung optischer Netze betrachtet. Wegen der hohen Datenmengen aus verschiedensten Anwendungen, die durch die optische Transportschicht geroutet werden, werden hier hohe Anforderungen an eine ausfallsichere Netzkonfiguration gestellt.

Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Hans-Florian Geerdes, Thorsten Koch, Arie Koster
Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B4

UMTS ist ein neuer Standard zur Mobilkommunikation. UMTS-Netze werden derzeit in vielen Ländern Europas aufgebaut und kommerziell eingeführt. Gegenüber dem etablierten GSM kann UMTS mit höheren Datenübertragungsraten ein breiteres Angebot an Daten- und Kommunikationsdiensten unterstützen. Dies ist vor allem der eingesetzten W-CDMA-Funktechnologie zu verdanken. Dabei werden viele Funksignale gleichzeitig auf 5 MHz breiten Frequenzbändern übertragen. Die Trennung der überlagerten Signale ist beim Empfänger aufgrund digitaler Signalkodierung möglich.

Das Ziel der Funknetzplanung ist, die erwartete Kundennachfrage nach verschiedenen Diensten auf möglichst effiziente Art befriedigen zu können. Die Dienste variieren in ihrem

Kapazitätsbedarf sehr stark zwischen einigen kbit/s für SMS bis hin zu mehreren hundert kbit/s für Videotelephonie oder Multimedia-Streaming. Neben ausreichender Kommunikationskapazität soll ein Netz auch eine weitgehend lückenlose Abdeckung im Versorgungsgebiet liefern. Eine Eigenschaft der W-CDMA Funktechnologie ist jedoch, dass Abdeckung und Kapazität sich ggf. durch zu starke Signalüberlagerungen (Interferenzen) stark negativ beeinflussen können. Deshalb muss mögliche Interferenz schon im Planungsprozess kontrolliert und begrenzt werden.

Die im EU-Projekt MOMENTUM begonnene Arbeit zur Dimensionierung des UMTS-Funknetzwerks wird im Rahmen dieses Projektes fortgeführt. Das Ziel ist es, für die in der Praxis auftretenden Planungsprobleme *nachweisbar gute* Lösungen zu produzieren.

Im Berichtszeitraum wurden vor allem Ansätze zur Analyse und Optimierung von Funknetzen auf der Basis von Mittelwerten der Verkehrsintensität weiterentwickelt [12]. Während herkömmliche Analyseverfahren aufwändige stochastische Simulationen verwenden, erlaubt der neue, stark vereinfachte Ansatz eine sehr schnelle Einschätzung der Güte eines Funknetzes. Zentraler Bestandteil der Methode sind lineare Gleichungssysteme, in denen *Kopplungsmatrizen* eine Schlüsselrolle spielen. Diese Matrizen enthalten wesentliche Informationen über das Verhalten des Funknetzes in sehr kompakter Form. Durch empirische Vergleiche mit allgemein anerkannten Simulationsmethoden konnte nachgewiesen werden, dass die vereinfachte Methode die wesentlichen Eigenschaften und die Lastsituation eines Netzes gut vorhersagen kann [11]. Ansätze zum Abbilden des Verhaltens eines realen Netzes, zum Beispiel bei Überlast, in diesem Modell wurden entwickelt.

Die neue, vereinfachte Sichtweise hat neue mathematische Optimierungsansätze ermöglicht. Zwei Methoden wurden dabei entwickelt: Einerseits können dank der effizienten Analyse viele Konfigurationsmöglichkeiten im Rahmen einer so genannten *lokalen Suche* in kürzester Zeit getestet werden. Andererseits wurde ein neuartiges gemischt-ganzzahliges lineares Modell zum zielgerichteten Planen der Kopplungsmatrizen entwickelt. Beide Methoden haben in ersten Tests ihre Leistungsfähigkeit bewiesen [11]. Abbildung 2.39 zeigt, wie die Qualität und Effizienz eines Funknetzes durch Optimierung verbessert werden kann.

Um die Vergleichbarkeit von Forschungsarbeiten zum Thema Funknetzplanung und -analyse zu erhöhen, wurden im Projekt Referenzdatensätze und Planungsszenarien aufbereitet und weiterentwickelt [17]. Auch in der entsprechenden Initiative MORANS⁷ im Rahmen des internationalen Verbundes COST 273⁸ hat sich das Projekt maßgeblich engagiert.

FAP Web

Bearbeitet von: Andreas Eisenblätter, Arie Koster

Im Jahr 2000 wurde das FAP Web [14] 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. [1, 13]) stehen auch praxisnahe Testdaten einschließlich Referenzlösungen zu Forschungszwecken zur Verfügung. Der Inhalt des FAP Webs geht ursprünglich aus zwei Doktorarbeiten [10, 16] sowie der Mitarbeit im EU-COST 259-Projekt [9] hervor.

⁷<http://morans.cost273.org>

⁸<http://www.lx.it.pt/cost273>

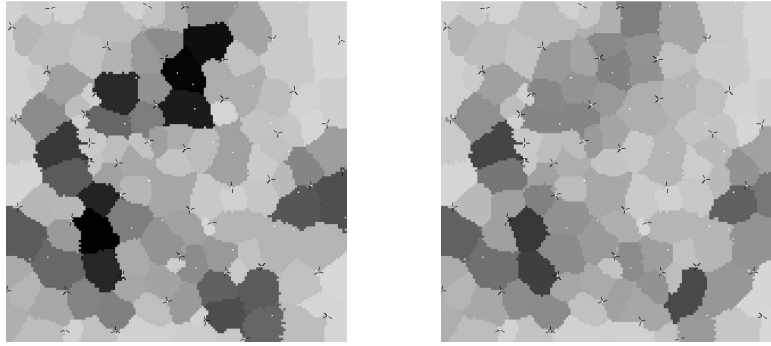


ABBILDUNG 2.39: Ergebnisse der Optimierung eines UMTS-Funknetzes in Berlin. Im linken Bild gibt es viele Zellen mit hoher Last (dunkle Bereiche). Eine geschickte Konfiguration der Funkantennen kann die Interferenz reduzieren und die Last zwischen den Zellen besser verteilen. Das umkonfigurierte Netz (rechtes Bild) kann dann dasselbe Nutzeraufkommen effizienter bedienen. Die Durchschnittslast und damit die Sendeleistungen der Antennen sinken.

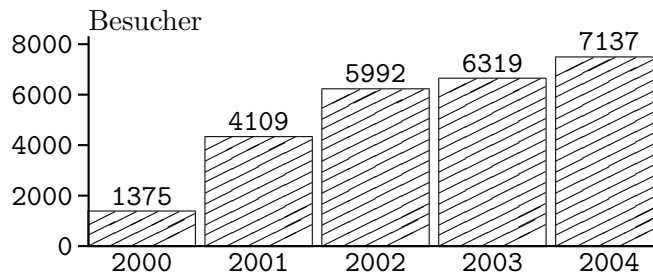


ABBILDUNG 2.40: Besucherzahl der Hauptseite des FAP Webs (<http://fap.zib.de>) seit Mitte 2000.

Das FAP Web weist seit seiner Einrichtung eine beständig wachsende Besucherzahl auf, wie in Abbildung 2.40 dargestellt. Zur Erhaltung der Attraktivität der Webseite wird das Literaturverzeichnis regelmäßig aktualisiert. Dieses wird seit einigen Jahren auch gespiegelt durch „The Collection of Computer Science Bibliographies“, einer Sammlung mit über 1,4 Millionen Referenzen zu wissenschaftlicher Literatur in der Informatik.

Optimale Zulassungskontrolle

Bearbeitet von: Manfred Brandt

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

Der IP-basierte Transport von Echtzeit-Diensten, wie beispielsweise von Sprache oder bewegten Bildern, wird als eine äußerst zukunftssträchtige Anwendung von Mobilfunknetzen der dritten Generation (UMTS) angesehen. Eine gute Qualität dieser Dienste setzt eine funktionierende Zulassungskontrolle voraus, die Dienst-Anforderungen dann ablehnt, wenn die Gefahr zu groß ist, dass das Transportsystem überlastet werden könnte.

Ziel dieses Projektes ist eine Verbesserung der Performance durch Berücksichtigung der On-Off-Struktur der Forderungen bei der Zulassungskontrolle. Hierzu wurde die folgende Zulassungskontroll-Strategie analysiert: Eine neu eintreffende Forderung wird genau dann

vom Netzknoten angenommen, wenn die aktuelle Paket-Ankunftsrate - die durch die gerade aktiven Forderungen erzeugt wird - nicht größer als ein gewisser Schwellenwert ist. Auch wenn dieser Schwellenwert kleiner als die Prozessorkapazität ist, kann es aufgrund der On-Off-Struktur der Forderungen zu Pufferüberläufen kommen. Deshalb werden häufig Token-Bucket-Algorithmen benutzt, um Überlast für die die Pakete bearbeitenden Prozessoren zu verhindern. Zur Sicherung einer guten Qualität wurden Algorithmen für die Wahrscheinlichkeit einer nicht akzeptierten Forderung sowie für die Wahrscheinlichkeit des Verlustes von Paketen akzeptierter Forderungen in Abhängigkeit vom Schwellenwert hergeleitet und implementiert.

Zur Reduktion der Komplexität wird die Fluid-Flow-Approximation benutzt, vgl. [8], innerhalb der die Paket-Quelle ein 2-Knoten-Netzwerk ist, das aber für reale Parameter noch immer von zu hoher Komplexität ist. Grenzfälle für die Parameter sind Ausgangspunkt einer Approximation der Dynamik aktiver Forderungen durch einen Geburts-Todes-Prozess, die eine Approximation der Verlustwahrscheinlichkeit von Forderungen impliziert. Für die Verlustwahrscheinlichkeit von Paketen bietet sich eine Approximation an, die auf dem zufälligen Quantum der während eines Zeitintervalls, in dem die Paket-Ankunftsrate die Token-Ankunftsrate übertrifft, ankommenden überzähligen Pakete beruht. Die Laplace-Stieltjes-Transformierte dieses Quantums ist als Kettenbruch darstellbar.

Überlastkontrolle im Internet

Bearbeitet von: Tobias Harks

Kooperationspartner: Congestion Control Group (TKN), TU-Berlin

Förderung: Graduiertenkolleg 621 (MAGSI/Berlin) der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG)

Durch immense Wachstumsraten und die anhaltende Vergrößerung der Reichweite gilt das Internet mittlerweile als *das* größte künstlich entwickelte Netzwerk. Ein wichtiger Teilspekt, der das Funktionieren des weltweiten paketbasierten Datentransfers über das Internet ermöglicht, ist die Überlastkontrolle in der Transportschicht des Internets.

Neben den traditionellen Internetanwendungen (File Transfer, Web-Surfing, E-Mail), die durch das Transportprotokoll TCP überlastsensitiv gesteuert werden, gewinnen Echtzeitanwendungen (Video, Internet-Telephonie) eine immer größere Bedeutung. Diese werden mit Hilfe des User Datagram Protocol (UDP) transportiert und verringern ihre Datenübertragung bei Überlastsituationen nicht. Somit stellt die rasante Entwicklung neuer Multimediatechnologien wie MPEG oder Voice-over-IP die Überlastkontrolle vor neue Herausforderungen.

Eine mathematische Beschreibung und Optimierung der Kontrollmechanismen in der Transportschicht für traditionelle Datenströme sowie für Echtzeitanwendungen ist das Hauptanliegen dieses Projekts. Dazu werden mit Methoden der nichtlinearen Optimierung, der Regelungstechnik und der optimalen Steuerung Transportprotokolle entwickelt, die folgende Eigenschaften aufweisen:

- Verhinderung von Netzüberlastsituationen
- Hohe Auslastung und faire Aufteilung der zur Verfügung stehenden Ressourcen
- Berücksichtigung der Echtzeitcharakteristiken von Multimedia-Anwendungen
- Stabile Leistung des Netzes (wenig Paketverluste, geringe Latenzzeit).

Im Berichtszeitraum haben wir die Grundlagen für ein neues Transportprotokoll geschaffen, welches die Datenübertragung von traditionellen Anwendungen und Echtzeitanwendungen überlastsensitiv und ressourceneffizient steuert [15]. Zudem haben wir ein neues Fairnesskriterium entwickelt, welches Echtzeiteigenschaften von Multimedia-Anwendungen berücksichtigt.

Langfristiges Ziel dieses Projektes ist es, mit Methoden der Spieltheorie die entwickelten Protokolle in ein ökonomisches Marktmodell einzubetten, um eine Preisdifferenzierung für verschiedene Stufen von Servicequalität zu ermöglichen.

Integrierte Planung von Multi-Level/Multi-Layer-Netzwerken

Bearbeitet von: Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Roland Wessälly

Kooperationspartner: E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG (Düsseldorf), T-Systems Nova GmbH (Berlin)

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B3

Große Telekommunikationsnetze untergliedern sich regional und technologisch in mehrere Teilnetze. Dabei werden unterschiedliche

- *Level* durch Kern- und Zugangsnetze sowie
- *Layer* durch die Art der Übertragungstechnologie

definiert. Abbildung 2.41 illustriert im linken Teil die Untergliederung eines Netzes in Kern- und Zugangsnetz. Das überregionale Kernnetz verbindet die wichtigsten Knoten miteinander und dient zum Routen der aggregierten Kommunikationsbedarfe zwischen den weniger stark angebundenen Knoten in den regionalen Zugangsnetzen. Im rechten Teil von Abbildung 2.41 ist ein Multi-Layer-Netzwerk dargestellt, in dem die einzelnen Schichten unterschiedliche Technologien nutzen. Im Beispiel wird der IP-Verkehr über ATM, SDH und schließlich optisch über WDM übertragen.

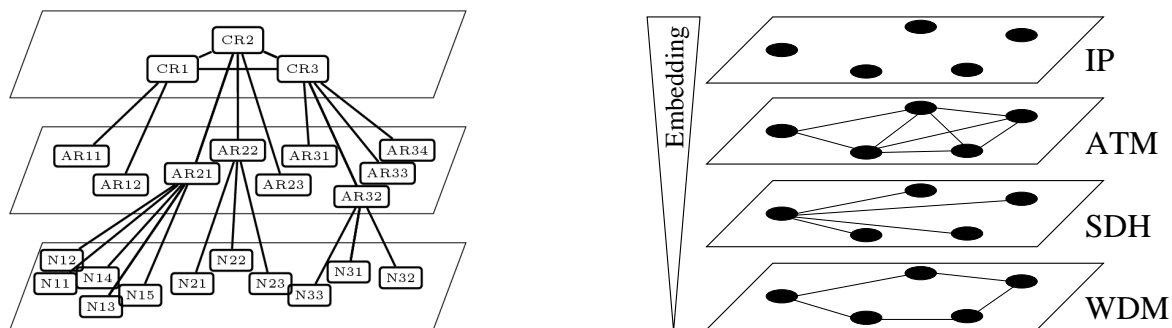


ABBILDUNG 2.41: Multi-Level- und Multi-Layer-Netzwerke

Schon bei der Planung eines einzelnen Layers oder Levels sind eine Reihe von Entscheidungen zu fällen, die sich in hohem Maße gegenseitig beeinflussen. Dazu gehören Entscheidungen über Standorte und Verbindungen (Topologie), die Art und Kapazität der Verbindungen zwischen den Standorten (Glasfaser, Kupferkabel, Richtfunkstrecke), die Konfiguration der Hardware an den Standorten (Cross-connects, Multiplexer, Interface-Karten) sowie das Routing aller

Kommunikationsbedarfe unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheitsbedingungen. Zur Planung einer einzelnen Netzschicht sind in den letzten 15 Jahren viele mathematische Modelle und Algorithmen entwickelt worden, die mit Erfolg auf praktische Planungsprobleme angewandt wurden (siehe z.B. [3, 5, 6, 23] und darin aufgeführte Referenzen).

Ziel des Projektes ist es, diese Modelle und Algorithmen zu erweitern, um eine integrierte Planung mehrerer Level bzw. Layer zu ermöglichen. Zusätzlich zu den oben aufgeführten Entscheidungen müssen hierbei insbesondere

- eine Zuordnung der Standorte zu einzelnen Teilnetzen und
- ein Routing für die Kommunikationsbedarfe über mehrere Teilnetze hinweg

bestimmt werden. Nur durch eine solche integrierte Planung können die Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Teilnetzen angemessen berücksichtigt werden.

Im Multi-Layer-Bereich gab es bisher nur einige heuristische Ansätze zur Lösung der Planungsaufgaben. Integrierte mathematische Modelle zur realistischen Beschreibung eines Multi-Layer-Netzwerks waren noch wenig entwickelt. Im letzten Jahr wurden in diesem Projekt ganzzahlige lineare Programme zur Multi-Layer-Planung entwickelt [22], die praktische Hardware- und Routinganforderungen – wie Netzelemente verschiedener Technologien oder die Einbettung von Bedarfen in andere Layer – genauer widerspiegeln als bisherige Modelle. Zusammen mit dem Projekt *Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze* wurde das neue Ausfallsicherheitskonzept *Demand-wise Shared Protection (DSP)* entworfen [24], das in mehreren technologischen Layern Anwendung finden kann. Gemeinsam mit unseren Kooperationspartnern E-Plus und T-Systems wurde mit der Entwicklung verschiedener XML-Formate zur Beschreibung von Planungsproblemen über mehrere Technologien hinweg begonnen. Sie sind eine wesentliche Voraussetzung dafür, praktische Daten für technologieübergreifende Planungsaufgaben auszutauschen und bestehende Modelle anwenden zu können.

Im Multi-Level-Bereich wurden bisher fast ausschließlich streng hierarchisch organisierte Netze untersucht, bei denen die Knoten der mittleren und unteren Ebenen stern- oder baumförmig an jeweils genau einen Knoten der nächsthöheren Ebene angebunden werden. Für die Planung von Multi-Level-Netzen mit solchen einfachen Zugangsnetzstrukturen wurden in den Vorjahren bereits verschiedene mathematische Modelle und effiziente Lösungsverfahren entwickelt (siehe z.B. [3, 5]). Im Berichtsjahr wurden im Rahmen dieses Projektes neue Planungsprobleme für Multi-Level-Netze mit komplexeren Zugangsnetzstrukturen untersucht. Bei großen Netzen wurden die Knoten der mittleren Ebene bisher aus Sicherheitsgründen häufig über zwei oder mehrere parallele Verbindungen mit ihrem jeweiligen Kernnetz-knoten verbunden. Gibt man die strenge Zuordnung zu jeweils einem Kernnetz-knoten jedoch auf, können solche Knoten auch über unterschiedliche Wege an jeweils zwei verschiedene Kernnetz-knoten angebunden werden. Aus Sicherheitsgründen müssen diese Wege natürlich weiterhin über physisch getrennte Trassen verlaufen. Da die beiden Anbindungswege jedoch, wie in Abbildung 2.42 dargestellt, von weiteren Knoten der mittleren Ebene mitgenutzt werden können, ergeben sich gegenüber der klassischen Doppelanbindung an jeweils einen Kernnetz-knoten große Kosteneinsparungsmöglichkeiten. In Zusammenarbeit mit dem Projekt *Optimierung des Wissenschaftsnetzes X-WiN* wurde für diese neue Version der Multi-Level-Netzplanung ein gemischt-ganzzahliges Optimierungsmodell entwickelt, mit dem auch große reale Probleminstanzen noch effizient gelöst werden können. Dieses Modell kam bei der Optimierung der Netzstruktur des zukünftigen Wissenschaftsnetzes X-WiN zum Einsatz.

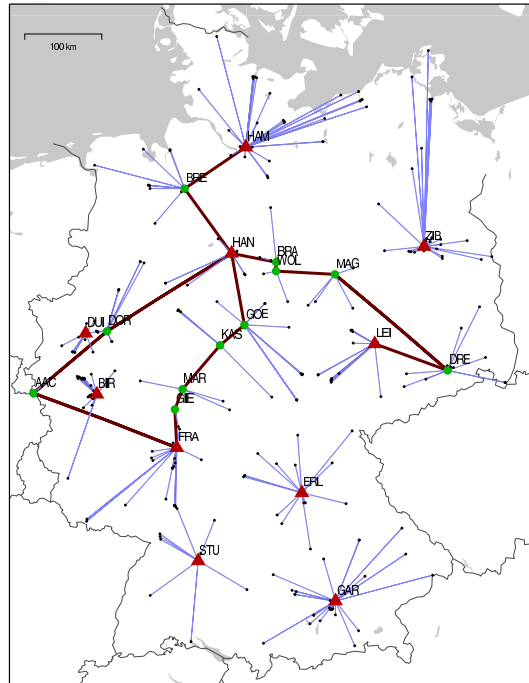


ABBILDUNG 2.42: Neuartige Zugangnetzstruktur im X-WiN: Knoten der mittleren Ebene müssen doppelt an einen Kernnetzknoden oder (über andere Knoten der mittleren Netzebene) an zwei verschiedenen Kernnetzknoden angebunden sein.

Betriebsoptimierung des Gigabit-Wissenschaftsnetzes (G-WiN)

Bearbeitet von: Andreas Bley

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

Das Deutsche Forschungsnetz (DFN) ist das von der Wissenschaft selbst verwaltete Hochleistungsnetz für Wissenschaft und Forschung in Deutschland. Es verbindet Hochschulen und Forschungseinrichtungen miteinander und unterstützt die Entwicklung und Erprobung neuer Anwendungen innerhalb der Internet2-Community in Deutschland. Der nationale Backbone des DFN ist das Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN. Es basiert auf modernster Glasfasertechnologie und zählt zu den weltweit leistungsfähigsten privaten Netzinfrastrukturen.

Die Steuerung der Servicequalität und das Internet-Routing liegen als Kernaufgaben für Wissenschaft und Forschung in den Händen des DFN-Vereins. Um einen qualitativ guten und gleichzeitig kostengünstigen Betrieb des G-WiN gewährleisten zu können, müssen die Netzkonfiguration und das Routing regelmäßig auf die aktuellen Verkehrsströme abgestimmt werden. Aus betrieblichen Gründen kann die Netzkonfiguration dabei nur beim Übergang von einer Ausbaustufe zur nächsten verändert werden. Das Routing der Verkehrsströme lässt sich über die Router-Software konfigurieren, und kann daher auch kurzfristig verändert werden. Es muß sich jedoch mit dem OSPF Protokoll (Open Shortest Path First) realisieren lassen. Um einen stabilen und störungsfreien Betrieb des Netzes zu gewährleisten, müssen bei der Planung auch mögliche Ausfälle von Knoten oder Verbindungen berücksichtigt werden.

Ein Schwerpunkt dieses Projektes war die Unterstützung des DFN-Vereins bei der Betriebsoptimierung des G-WiN. Für die Planung der vierten Ausbaustufe des G-WiN und die anschließende Betriebsoptimierung wurden während des Berichtszeitraums am ZIB zahlreiche Optimierungsrechnungen mit verschiedenen Verkehrsprognosen und technischen Rahmenbedingungen durchgeführt. Dabei waren mehrere Erweiterungen der in den Vorjahren entwickelten mathematischen Modelle und Algorithmen [2, 3, 4] nötig, um die Möglichkeit der Mehrfachanbindung eines Nutzerstandortes an verschiedene Kernnetzknotten in der Optimierung korrekt berücksichtigen zu können.

Der zweite Schwerpunkt des Projektes war die Weiterentwicklung und Evaluierung der verwendeten Optimierungsverfahren. Testrechnungen mit alten Verkehrsdaten des G-WiN zeigten, dass sich mit den bisher verwendeten Methoden längerfristige und mehrere Zeithorizonte überspannende Netzplanungsprobleme nicht in praktikabler Zeit lösen lassen. Um effiziente Lösungsverfahren zur Mehrperiodenplanung zu entwickeln, bedarf es auf jeden Fall einer intensiveren mathematischen Untersuchung dieser Probleme und ihrer speziellen Dekompositionseigenschaften. Wegen der realen Gegebenheiten bei der Ausbauplanung des G-WiN, insbesondere wegen der großen Vorlaufzeiten für Netzumstellungen sowie der schlecht vorhersagbaren langfristigen Verkehrsentwicklung, ist der praktische Nutzen einer Mehrperiodenplanung gegenüber der bisher durchgeführten Optimierung für einzelne Ausbaustufen jedoch sehr zweifelhaft. Der Schwerpunkt bei der Weiterentwicklung der Methodik wurde daher auf die Verbesserung der Verfahren zur Kosten- und Qualitätsoptimierung für eine einzelne Planungsperiode gelegt. Verschiedene heuristische Ansätze zur schnelleren Berechnung von zulässigen Lösungen wurden neu implementiert und getestet, u.a. ein genetischer Algorithmus zur Kostenoptimierung von OSPF-Netzen.

Darüber hinaus wurde während der Projektlaufzeit die Möglichkeit geschaffen, den bisher im Optimierungsverfahren verwendeten lizenzpflichtigen Löser CPLEX für lineare und ganzzahlige Programme durch die am ZIB entwickelten und (akademisch) frei verfügbaren Löser SOPLEX und SCIP zu ersetzen. Dies erlaubt es, die realen Optimierungsprobleme auch ohne die zusätzliche Anschaffung von CPLEX effizient zu lösen.

Optimierung des Wissenschaftsnetzes X-WiN

Bearbeitet von: Andreas Bley

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

Um steigenden Datenmengen, neuen multimedialen Anwendungen und den speziellen Anforderungen von Grid/e-Science an Wissenschaftsnetze gerecht zu werden, soll ab 2006 das G-WiN als technische Plattform des Deutschen Forschungsnetzes durch das Nachfolgenetz X-WiN abgelöst werden. Mit deutlich mehr Kernnetz-Standorten als bisher soll das X-WiN flexibler konfigurierbar sein und eine bessere Versorgung der Wissenschaft mit Netzdiensten ermöglichen. Neben SDH soll im X-WiN auch GigabitEthernet-Technologie zum Einsatz kommen. Die Inbetriebnahme des X-WiN ist für Ende 2005 geplant.

Das Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung mathematischer Modelle und Algorithmen zur Optimierung von Aufbau und Betrieb des X-WiN. Mit diesen soll der DFN-Verein bei der Lösung der praktisch auftretenden Planungsprobleme unterstützt werden.

Während des Berichtszeitraumes wurde in erster Linie die Optimierung der ersten Ausbaustufe des X-WiN untersucht. Dabei war zu entscheiden, wie viele Hierarchieebenen das Netz

haben soll, wie viele und welche Kernnetzknotten eingerichtet und welche Verbindungen mit welchen Übertragungstechnologien installiert werden sollen. Ziel ist die Minimierung der Gesamtnetzkosten. Insbesondere die Wahl der Hierarchieebenen und der Kernnetzknotten ist von entscheidender Bedeutung, weil diese Entscheidungen extrem langfristig sind und große Auswirkungen auf den Netzbetrieb und alle nachfolgenden Planungsschritte haben.

Im X-WiN müssen nicht nur die Kernnetzknotten der obersten Ebene, sondern auch die Knotten der mittleren Ebenen sicher angebunden sein. Dies bedeutet, dass sie jeden anderen Knotten der mittleren oder höchsten Ebene über mindestens zwei verschiedene Wege erreichen können. Im Gegensatz zum G-WiN und zu vielen anderen großen Datennetzen muss das X-WiN jedoch nicht zwangsläufig eine einfache Baum- oder Sternstruktur in den niedrigeren Hierarchieebenen haben. Neben der sonst üblichen Doppelanbindung der Knotten der mittleren Ebene an jeweils einen einzelnen Kernnetzknotten über logisch parallele, aber physisch getrennte Wege kann im X-WiN ein solcher Knotten auch an zwei verschiedenen Kernnetzknotten angebunden werden. Die beiden Anbindungswege dürfen in diesem Fall weitere Knotten der mittleren Ebene enthalten, müssen aber ebenfalls über physisch getrennte Trassen verlaufen. Um außerdem eine niedrige Übertragungszeit zu garantieren, dürfen diese Wege eine bestimmte Länge nicht überschreiten. Die Möglichkeit, dass sich mehrere Knotten der mittleren Ebene für ihre Anbindung an Kernnetzknotten Verbindungen teilen können, kann gegenüber der klassischen Baum- oder Sternstruktur mit Doppelanbindungen zu großen Kosteneinsparungen führen.

Für diese neue Version der Netzhierarchie- und Strukturplanung mit Anbindungen an mehrere Knotten und unter Berücksichtigung von Trassenausfällen wurde im Rahmen des Projektes *Integrierte Planung von Multi-Level/Multi-Layer-Netzwerken* ein gemischt-ganzzahliges Optimierungsmodell entwickelt, mit dem auch große reale Probleminstanzen noch effizient gelöst werden können. Dieses Modell kam bei der Optimierung des X-WiN zum Einsatz.

Für die Planung der ersten Ausbaustufe wurden am ZIB zahlreiche Optimierungsrechnungen mit unterschiedlichen Kosten- und Verkehrsprognosen oder technischen Randbedingungen durchgeführt. Abbildung 2.43 zeigt exemplarisch die Gesamtnetzkosten in Abhängigkeit von der Anzahl der gewählten Kernnetzknotten für drei Planungsszenarien. In die Auswahl der Kernnetzknotten gehen neben den technischen und strukturellen Vorgaben im Wesentlichen die Kosten für die verschiedenen angebotenen Verbindungen, die Kosten für das Einrichten von Kernnetzknotten an den einzelnen Standorten sowie die Zugangsbandbreiten der Nutzer ein. Bei der Dimensionierung der Verbindungen und der Routenplanung werden neben den aggregierten IP-Verkehrsanforderungen aus Email, WWW und ähnlichen Diensten auch explizite Punkt-zu-Punkt-Verbindungsanforderungen für Grid-Computing, Testbeds und andere breitbandige Anwendungen berücksichtigt.

Im Rahmen dieses Projektes wurde der DFN-Verein auch bei der Vorbereitung der Ausschreibung sowie des Bewertungs- und Vergabeverfahrens für die Dienste und Aufträge des X-WiN unterstützt.

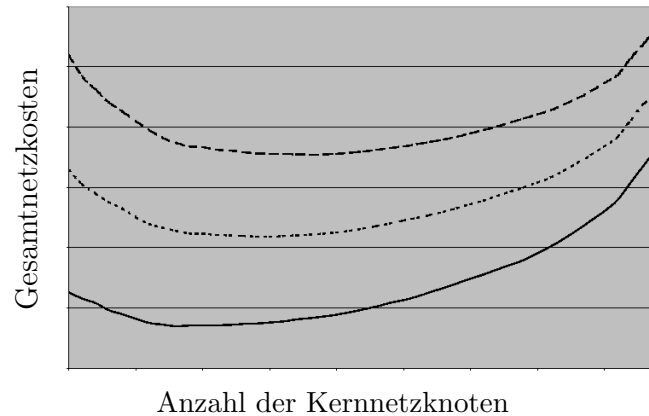


ABBILDUNG 2.43: Abhängigkeit der Gesamtnetzkosten von der Anzahl der Kernnetzknotten für verschiedene Entwicklungen der Kosten für die regionalen Zugangsleitungen zwischen 2Mbit/s und 622 Mbit/s (durchgehende Linie entspricht 80%, gepunktete Linie 100% und gestrichelte Linie 120% der gegenwärtigen Zugangsleitungskosten).

Optimale Kommunikationsstrukturen für dezentrale Energienetze

Bearbeitet von: Andreas Bley, Adrian Zymolka

Kooperationspartner: Institut für Solare Energieversorgungstechnik ISET e.V. (Kassel), Siemens AG (Nürnberg), EUS GmbH (Dortmund), Envidatec GmbH (Hamburg), SMA Regelsysteme AG (Niestetal), Deutscher Wetterdienst (Hamburg), Fraunhofer Institut für Systemtechnik und Innovationsforschung ISI (Karlsruhe), Fraunhofer Institut für Solare Energiesysteme ISE (Freiburg), RWTH Aachen, Brandenburgische TU Cottbus, Universität Kassel, Universität Magdeburg, Universität Paderborn

Förderung: BMBF-Netzwerkprojekt „Optimierung des Einsatzes dezentraler Energieversorgungssysteme durch Einbindung moderner Kommunikationstechniken – Energie und Kommunikation“ im Vernetzungsfonds Erneuerbare Energien

Nationale Energieversorgungsnetze werden gegenwärtig überwiegend von wenigen großen Erzeugern gespeist und lassen sich somit gut zentral steuern. Die angestrebte stärkere Nutzung regenerativer Energiequellen führt jedoch durch die Integration zahlreicher mittlerer und kleiner Anbieter zu stark dezentralen Energienetzen. Aufgaben wie Energie- und Lastmanagement oder PowerQuality-Management werden dadurch deutlich komplexer als in konventionellen Energienetzen. Eine effektive und bedarfsgerechte Steuerung sowie ein (für alle Beteiligten) wirtschaftlicher Betrieb solch dezentraler Energienetze kann nur durch die enge Kooperation zwischen Erzeugern, Netzbetreibern und Nutzern erreicht werden.

Im Rahmen des thematischen Netzwerkes „Optimierung des Einsatzes dezentraler Energieversorgungssysteme durch Einbindung moderner Kommunikationstechniken – Energie und Kommunikation“ soll eine Gesamtvision entwickelt werden, wie die dabei auftretenden Probleme und neuartigen Fragestellungen technisch und organisatorisch gelöst werden können. Dazu sollen zunächst mögliche Szenarien einer dezentralen Energieversorgung mit einem hohen Anteil an erneuerbaren Energien entworfen werden. Unter Berücksichtigung der zukünftigen Rahmenbedingungen sollen anschließend neue Konzepte für eine nachhaltige Energieversorgung und entsprechende Betriebsführungs- und Netzmanagementstrategien entworfen und diskutiert werden. Ein wichtiges organisatorisches Ziel des thematischen Netzwerkes ist die

Schaffung der erforderlichen Strukturen, um die jeweiligen Fähigkeiten und das Know-how der auf dem Gebiet der Energie- und Kommunikationstechnologie tätigen außeruniversitären Institute, Hochschulen und Industrieunternehmen miteinander zu verknüpfen.

In vier Arbeitsgruppen untersuchen die beteiligten Einrichtungen Fragestellungen in den Schlüsselbereichen

- Power-, Quality- und Netzmanagement,
- Kommunikationsstrukturen und -techniken,
- Energiemanagement und Betriebsführungsstrategien sowie
- Informationsmanagement.

Das ZIB ist innerhalb des Netzwerks Energie und Kommunikation im Bereich Kommunikationsstrukturen und -techniken aktiv. Dort werden die informationstechnischen Aspekte bei der Vernetzung der einzelnen Komponenten untersucht. Dazu gehören die Vernetzungshierarchie, die Übertragungsprotokolle, die Informationsverarbeitung (Filterung, Bündelung, Aggregation) sowie die Schnittstellen zu den Anwendungen (Last- und Energiemanagement, Anlagensteuerung, etc). Das ZIB bringt hier seine langjährige Erfahrung bei der Planung und Optimierung von Kommunikationsnetzen für unterschiedlichste Technologien in die Entwicklung der neuen Kommunikationsstrukturen für dezentrale Energienetze ein.

Seit Beginn des Projektes wurden die für die verschiedenen Anwendungen zu kommunizierenden Informationen sowie die unterschiedlichen prinzipiell nutzbaren Übertragungsmedien und -verfahren erfasst und analysiert. Am ZIB wurde mit der Entwicklung eines mathematischen Modells zur Planung der optimalen Kommunikationsstruktur für ein gegebenes Netzzenario begonnen [7]. Dieses Modell soll unter Berücksichtigung der Anforderungen der verschiedenen Anwendungen an die einzelnen Übertragungstechnologien die Wirtschaftlichkeit des gesamten Kommunikationsnetzes optimieren. Der entwickelte Prototyp des Modells soll in Zusammenarbeit mit allen Netzwerkpartnern in den folgenden Jahren schrittweise an die tatsächlichen praktischen Anforderungen in Energienetzen mit dezentralen erneuerbaren Energieträgern angepasst werden.

Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze

Bearbeitet von: Arie Koster, Sebastian Orlowski, Roland Wessäly, Adrian Zymolka

Kooperationspartner: T-Systems Nova GmbH (Berlin), Claus Gruber (TU München)

Heutige Telekommunikationsnetze basieren zunehmend auf optischer Technologie, bei der digitale Signale als kurze Lichtpulse auf Glasfasern übermittelt werden. Neben sehr hohen Übertragungsraten erlaubt das optische Medium ein sogenanntes *Wavelength Division Multiplexing* (WDM), bei dem auf einer Glasfaser durch Verwendung verschiedener Wellenlängen mehrere Kanäle parallel genutzt werden können. Die modernsten Bausteine sind *Optical Cross-Connects* (OXC) in den Netzknoten, die als optische Schalter das durchlaufende Signal zur Weitervermittlung nicht mehr wie zuvor in elektronische Form umwandeln müssen. Durch die Integration dieser Schalteinheiten innerhalb der Netze entstehen durchgehend optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden.

Beim Auf- und Ausbau optischer Netze stellt sich für Netzbetreiber die Aufgabe, zu gegebenen Kommunikationsbedarfen eine Konfiguration der einzurichtenden Lichtwege sowie der dafür zu installierenden Hardware-Komponenten zu ermitteln, deren Gesamtkosten minimal

sind. Zusätzlich sind Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen, um auch in Störsituationen noch einen festgelegten Mindestverkehr garantieren und geschützte Verbindungen aufrechterhalten zu können. Zur Lösung dieser anspruchsvollen Planungsaufgabe werden effiziente mathematische Methoden benötigt, mit denen sich geeignete Netzkonfigurationen mit beweisbarer Güte bestimmen lassen.

Im Berichtszeitraum wurde die konzeptionelle und methodische Weiterentwicklung des in den Vorjahren hergeleiteten Lösungsverfahrens [26] vorangetrieben. In einem Dekompositionsansatz wird das hochkomplexe Gesamtproblem in zwei aufeinanderfolgende Teilaufgaben zerlegt. 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 Methoden [25] adaptieren. Ferner wurde ein neues Ausfallsicherheitskonzept [19] entworfen, das ursprünglich die Vorgabe der Anzahl erforderlicher Ersatzwege als Parameter erforderte. Durch die Integration der Parameterbestimmung innerhalb der Optimierung entsteht ein völlig neuartiges Modell zum Design ausfallsicherer Netze [24], das sich über optische Netze hinaus auch für andere Technologien eignet. Erste Ergebnisse belegen die damit erzielbaren Kosteneinsparungen, eine umfassende Rechenstudie ist in Vorbereitung.

Im zweiten Teilproblem ist durch den Einsatz von WDM für die resultierenden Lichtwege eine konfliktfreie Wellenlängenzuordnung zu ermitteln. Das Wechseln der Wellenlänge innerhalb eines Lichtweges ermöglichen Konverter, die jedoch zusätzliche Kosten verursachen. Daher besteht das Ziel in der Minimierung der benötigten Konverteranzahl. Die zuvor entwickelten Heuristiken [18] zur schnellen Berechnung geeigneter Wellenlängenzuordnungen wurden im Berichtszeitraum weiter verbessert [20]. Zur Güteabschätzung dienen untere Schranken auf Basis einer speziellen Formulierung als ganzzahliges lineares Programm. Dessen theoretisch gute Eigenschaften bestätigten sich im praktischen Einsatz [20, 21]. Im Ergebnis ließ sich durch die Kombination beider Ansätze für alle betrachteten Instanzen die Optimalität der erzielten Lösungen nachweisen.

Publikationen

- [1] K.I. Aardal, C.P. M. van Hoesel, A.M. C.A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and solution techniques for the frequency assignment problem*, 4OR: Quarterly Journal of the Belgian, French and Italian Operations Research Societies 1(4):261–317, 2003.
- [2] A. Bley, *A Lagrangian Approach for Integrated Network Design and Routing in IP Networks*, Tagungsband zur „International Network Optimization Conference (INOC) 2003“, Evry/Paris, Frankreich, Oktober 2003, Seiten 107–113, auch als Report 03-29, ZIB, 2003.
- [3] A. Bley und T. Koch, *Optimierung in der Planung und beim Aufbau des G-WiN*, DFN-Mitteilungen, Nr. 54, Seiten 13–15, 2000, auch als Report 00-48, ZIB, 2000.
- [4] A. Bley und T. Koch, *Integer Programming Approaches to Access and Backbone IP-Network Planning*, Report 02-41, ZIB, 2002.
- [5] A. Bley, T. Koch, und R. Wessälly, *Large-scale Hierarchical Networks: How to Compute an Optimal Architecture?*, Tagungsband zum „11th International Telecommunications

- Network Strategy and Planning Symposium (Networks 2004)“, Wien, Juni 2004, Seiten 13–16, auch als Report 04-04, ZIB, 2004.
- [6] A. Bley, A. M. C. A. Koster, A. Kröller, R. Wessälly und A. Zymolka, *Kosten- und Qualitätsoptimierung in Kommunikationsnetzen*, Tele-Kommunikation Aktuell 07/08, 2003, auch als Report 03-31, ZIB, 2003.
- [7] A. Bley und A. Zymolka, *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*, Tagungsband zum „Achten Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“, Kassel, November 2003, Seiten 61–77, auch als Report 03-29, ZIB, 2003.
- [8] A. Brandt und M. Brandt, *On the distribution of the number of packets in the fluid flow approximation of packet arrival streams*, Queueing Syst. **17** (1994), 275–315.
- [9] 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.
- [10] A. Eisenblätter, *Frequency assignment in GSM networks: Models, heuristics, and lower bounds*, Dissertation, TU Berlin, Fakultät 2, 2001.
- [11] A. Eisenblätter und H.-F. Geerdes, *A novel view on cell coverage and coupling for UMTS radio network evaluation and design*, Tech. Report 163, MATHEON, Berlin, November 2004, erscheint in: in Proc. of INOC’05.
- [12] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, T. Koch, A. Martin und R. Wessälly, *UMTS Radio Network Evaluation and Optimization Beyond Snapshots*, Report 04-15, ZIB, 2004.
- [13] A. Eisenblätter, M. Grötschel und A. M. C. A. Koster, *Frequency assignment and ramifications of coloring*, Discussiones Mathematicae Graph Theory **22**:51–88, 2002.
- [14] A. Eisenblätter und A. M. C. A. Koster, *FAP web*, 2000, <http://fap.zib.de>.
- [15] T. Harks, *Utility Proportional Fair Resource Allocation: An Optimization Oriented Approach*, Tagungsband zum Workshop “QoS in Multiservice IP Networks”, Catania, Italy, Springer Lecture Notes on Computer Science (LNCS 3375), Februar 2005, 61–74. Auch als Report 04-32, ZIB, 2004.
- [16] A. M. C. A. Koster, *Frequency Assignment - Models and Algorithms*, Dissertation, Universität Maastricht, 1999.
- [17] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, U. Türke und T. Koch, *MOMENTUM data scenarios for radio network planning and simulation (extended abstract)*, Tagungsband zu “WiOpt’04” (Cambridge, UK), 2004.
- [18] A.M.C.A. Koster und A. Zymolka, *Minimum Converter Wavelength Assignment in All-Optical Networks*, Tagungsband zur „8th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)“, Gent, Belgien, Februar 2004, Seiten 517–535.

- [19] A.M.C.A. Koster, A. Zymolka, M. Jäger und R. Hülsermann, *Demand-wise Shared Protection for Meshed Optical Networks*, Journal of Networks and Systems Management **13** (2005), Nr. 1, Seiten 35–55.
- [20] A.M.C.A. Koster und A. Zymolka, *Provably Good Solutions for Wavelength Assignment in Optical Networks*, Tagungsband zur „9th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)“, Mailand, Italien, Februar 2005, auch als Report 04-40, ZIB, 2004.
- [21] A.M.C.A. Koster und A. Zymolka, *Linear Programming Lower Bounds for Minimum Converter Wavelength Assignment in Optical Networks*, Tagungsband zur „International Network Optimization Conference (INOC)“, Lissabon, Portugal, März 2005, auch als Report 04-41, ZIB, 2004.
- [22] S. Orlowski und R. Wessäly, *An Integer Programming Model for Multi-Layer Network Design*, Report 04-49, ZIB, 2004.
- [23] M. Pioro und D. Medhi, *Routing, Flow, and Capacity Design in Communication and Computer Networks*, Morgan Kaufmann Publishers, 2004.
- [24] R. Wessäly, S. Orlowski, A. Zymolka, A.M.C.A. Koster und C. Gruber, *Demand-wise Shared Protection revisited: A new model for survivable network design*, Tagungsband zur „International Network Optimization Conference (INOC)“, Lissabon, Portugal, März 2005.
- [25] R. Wessäly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Dissertation, TU Berlin. Cuvillier Verlag, ISBN 3-89712-864-0, 2000.
- [26] A. Zymolka, A.M.C.A. Koster und R. Wessäly, *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*, Tagungsband zur „7th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM)“, Budapest, Ungarn, Februar 2003, Seiten 61–80.

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.

Viele Probleme aus Bereichen wie z. B. Telekommunikation, Verkehr oder Chip-Entwicklung lassen sich als sogenannte *Gemischt-Ganzzahlige Programme* (mixed integer programs, MIPs) formulieren.

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.

Aber gerade weil sich immer mehr Probleme als MIP modellieren lassen, werden die Anforderungen an die Lösungsalgorithmen immer größer. Im Schwerpunkt *Ganzzahlige Optimierung* wird derzeit hauptsächlich versucht, die grundlegenden Lösungsalgorithmen zu verbessern,

um MIPs möglichst mittels eines allgemeinen, von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus lösen zu können.

Bereits in 2003 wurde begonnen, die Basis dafür zu schaffen, besser mit Unzulässigkeit umgehen zu können. Im Berichtszeitraum wurde dieses Vorhaben weiter verfolgt, wobei insbesondere bereits bekannte Techniken zum Lösen des *Satisfiability-Problems* (SAT) auf die Gemischt-Ganzzahlige Programmierung übertragen wurden.

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.
- *Ganzzahlige Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme*
erforscht die kombinatorische Struktur von Verallgemeinerungen verschiedener 0-1-Probleme, um die Lösbarkeit von MIPs mit nicht-binären ganzzahligen Variablen zu verbessern.
- *Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen*
ist eine Anwendung, welche die Kombination von Mixed-Integer- und Constraint-Programming erfordert.
- *MIPLIB*
ist eine Bibliothek mit Testinstanzen für MIP-Löser.
- *SteinLib*
ist eine Bibliothek mit Testinstanzen für das Steinerbaumproblem.

Des Weiteren wird innerhalb des Schwerpunkts die folgende Software entwickelt (siehe auch Abschnitt 6.3):

- *Modellierungssprache Zimpl*
beschleunigt die Umsetzung vom mathematischen Modell zur Eingabe für MIP-Löser.
- *Basisverifizierer perPlex*
erlaubt es, exakte Optimallösungen von Linearen Programmen zu bestimmen.
- *LP-Löser SoPlex*
dient zum Lösen von Linearen Programmen, die unter anderem bei der Lösung von Gemischt-Ganzzahligen Programmen als Unterprobleme auftreten.
- *CIP-Framework SCIP*
dient zum Lösen von Gemischt-Ganzzahligen Programmen, kann als Branch-Cut-and-Price-Framework eingesetzt werden und erlaubt das Lösen von „Constraint Integer Programs“ (CIPs).

Gemischt-Ganzzahlige Programmierung

Bearbeitet von: Tobias Achterberg, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt)

Der bisher erfolgreichste Ansatz zur Lösung von Gemischt-Ganzzahligen Programmen (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. Die Erfüllung der Ganzzahligkeitsbedingungen wird durch Einbettung dieser Strategie in einen Schnittebenen- und Branch-and-Bound-Rahmen erzwungen.

Ein entscheidender Aspekt bei dieser Enumeration ist die Wahl des *Branchings*, welches die Aufteilung des Gesamtproblems in Teilprobleme vorgibt. Im Rahmen einer ausführlichen Untersuchung wurde eine Verallgemeinerung bekannter Branching-Regeln entwickelt [2], die in einer Verbesserung im Laufzeitverhalten des MIP-Lösers resultierte.

Das Branch-and-Bound-Verfahren wird auch in Algorithmen des Constraint Programming (CP) eingesetzt, um das gegebene Problem sukzessive in kleinere Teilprobleme zu zerlegen und auf diese Weise zu lösen. Zur Beschränkung des Suchraums und zur Vermeidung der expliziten Enumeration aller potentiellen Lösungen verwendet man aber keine LP-Relaxierungen und Schnittebenen. Stattdessen werden in den Teilproblemen die Wertebereiche der Variablen mittels Inferenz eingeschränkt (Constraint Propagation) sowie zusätzliche abgeleitete Nebenbedingungen hinzugefügt. Dies entspricht den Schnittebenen des MIP, ist in seiner Anwendung aber nicht wie MIP auf lineare Nebenbedingungen beschränkt.

Durch Integration von MIP- und CP-Techniken erhofft man sich, gleichzeitig von der flexibleren Modellierungsart des CP und den effizienten, auf die spezielle Problemstruktur zugeschnittenen Lösungsmethoden des MIP zu profitieren. Insbesondere kann das Behandeln numerisch schwieriger Nebenbedingungen durch CP dabei helfen, die Stabilität der unterliegenden Linearen Programme zu verbessern.

Mit Hilfe der Vorlage des am ZIB entwickelten MIP-Lösers SIP [7] wurde im Berichtsjahr das Framework SCIP [1] weiterentwickelt, das die Integration von MIP und CP realisiert. Mit SCIP entwickelte Algorithmen können auf einfache Weise von den komplementären Stärken beider Techniken profitieren. Die implementierten Komponenten erlauben es bereits, das Framework als MIP- und als SAT-Löser einzusetzen.

Ganzzahlige Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme

Bearbeitet von: Arie Koster, Adrian Zymolka

Die Erforschung der kombinatorischen Struktur verschiedener 0-1-Probleme hat zu Resultaten geführt, die bei der Lösung allgemeiner Ganzzahliger Linearer Programme mit binären Variablen hilfreich eingesetzt werden können. Ein plakatives Beispiel dafür stellen stabile Mengen in Graphen dar. Eine stabile Menge ist eine Menge paarweise nicht benachbarter Knoten des Graphen. Durch die Untersuchung des Stabile-Mengen-Polytops wurden verschiedene Ungleichungen (vgl. [3]) identifiziert, die auch für zahlreiche weitere Ganzzahlige Lineare Programme gültige Bedingungen darstellen. So werden beispielsweise Clique-Ungleichungen von heutigen Lösern standardmäßig erkannt und – sofern geeignet – eingesetzt. Sobald die binären Variablen jedoch in ganzzahlige Größen übergehen, haben die Löser Schwierigkeiten, ähnliche zugrunde liegende Strukturen zu erkennen und auszunutzen. In diesem Projekt beschäftigen wir uns daher mit ganzzahligen Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme.

Im Berichtszeitraum wurde die Verwertung der Erkenntnisse aus der vorangegangenen theoretischen Untersuchung des Stabile-Multimengen-Polytops (vgl. [5, 6]) in Angriff genommen. Ähnlich zu der Nutzung der bereits erwähnten Clique-Ungleichungen für binäre Programme lassen sich auch die für das Stabile-Multimengen-Polytop gültigen verallgemeinerten Kreis-Ungleichungen zur Verstärkung von linearen Relaxierungen für allgemeine Ganzzahlige Programme heranziehen. Dabei erweitern wir die Betrachtung auf die von Caprara und

Fischetti [4] betrachteten $\{0, 1/2\}$ -Schnittebenen als Oberklasse der verallgemeinerten Kreis-Ungleichungen. Eine Rechenstudie auf den Instanzen der MIPLIB [8] hat das Verbesserungspotential aufgezeigt, das durch zusätzliche Separierung dieser Ungleichungen erzielbar ist. Hierfür haben wir zunächst mittels exakter Lösung ganzzahliger Hilfsprogramme über dem $\{0, 1/2\}$ -Schnittebenen-Abschluss optimiert, wodurch die Geschwindigkeit des Lösungsprozesses deutlich verlangsamt wurde. Durch den Einsatz verbesserter Methoden zum Preprocessing konnte dieser Effekt teilweise kompensiert und die Performance gesteigert werden. Ferner hat eine Analyse der Verbesserungsgüte der einzelnen Separierungen ergeben, dass viele der gefundenen Ungleichungen nur marginalen Fortschritt bewirken. Als nächster Schritt bietet es sich daher an, möglichst effektive Ungleichungen zu identifizieren und zu charakterisieren und durch darauf abzielende Heuristiken einen guten Kompromiss zwischen Separierungsdauer und -effekt anzustreben.

Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen

Bearbeitet von: Tobias Achterberg, Thorsten Koch

Kooperationspartner: Infineon Technologies AG; Wolfgang Kunz, Dominik Stoffel, Markus Wedler (Technische Universität Kaiserslautern)

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

In der Chipherstellung besteht ein großer Anteil der Entwicklungsarbeit aus der Validierung des Schaltungsentwurfs und der verschiedenen Zwischenergebnisse auf dem Weg zum ersten Prototypen des Chips. Als Alternative zur Fehlerprüfung durch Simulation gewinnt die Technik des formalen Beweisens bestimmter Eigenschaften auch bei komplexen Schaltungen zunehmend an Bedeutung.

Während der Entwicklung eines Chips durchläuft der Schaltungsentwurf verschiedene Darstellungsebenen. Beginnend mit der Spezifikation der Schaltung in einer Hardware-Beschreibungssprache wie z. B. Verilog oder VHDL wird der Entwurf umgesetzt in die sogenannte Register-Transfer-Ebene, aus der eine Darstellung auf Gatter-Ebene und schließlich auf Transistor-Ebene erzeugt wird.

Bisher verwendete Techniken zum formalen Beweisen einer Eigenschaft operieren auf Gatter-Ebene. Die Gatternetzliste wird gemeinsam mit der zu prüfenden Eigenschaft in ein „Satisfiability“-Problem (SAT) transformiert, so dass dieses mit herkömmlichen SAT-Algorithmen gelöst werden kann. Dieser Ansatz stößt aber insbesondere bei Schaltungen, die arithmetische Operationen implementieren, auf Komplexitätsprobleme.

In der vom ZIB bearbeiteten Teilaufgabe des BMBF-Projektes „Valse-XT“ werden Beweistechniken auf einer höheren Ebene, nämlich der Register-Transfer-Ebene, entwickelt und implementiert. Auf dieser Ebene sind die Register nicht vollständig in Bits aufgelöst, sondern werden als ganze Zahlen entsprechender Bitbreite behandelt. Das Ziel ist es, auf diese Weise strukturelle Eigenschaften der Schaltung für den Beweis einer Eigenschaft besser auszunutzen, um so auch Schaltungen mit für SAT-Löser schwierigen arithmetischen Operationen der formalen Eigenschaftsverifikation zugänglich zu machen.

Das Verifikationsproblem auf Register-Transfer-Ebene wird als Constraint Integer Program (CIP) modelliert und mit einer Kombination von Techniken des Mixed Integer Programming (MIP) und des Constraint Programming (CP) gelöst. Dazu wird das am ZIB entwickelte Framework „SCIP“ [1] zur Lösung von CIPs eingesetzt.

#Bits	Addierer Eigenschaft #6			Addierer Eigenschaft #9		
	SAT	CIP	CIP/AP	SAT	CIP	CIP/AP
5	0,0 s	0,2 s	0,1 s	0,7 s	0,3 s	0,1 s
10	0,6 s	0,3 s	0,3 s	7,5 s	0,5 s	0,2 s
15	0,9 s	0,6 s	0,5 s	28,1 s	0,4 s	0,1 s
20	4,0 s	1,2 s	0,9 s	77,5 s	2,3 s	1,2 s
25	5,4 s	1,6 s	1,2 s	139,8 s	3,0 s	1,6 s
30	8,1 s	2,1 s	1,6 s	169,9 s	4,4 s	2,1 s
35	10,3 s	3,0 s	2,2 s	244,6 s	7,9 s	2,8 s
40	12,2 s	4,5 s	2,4 s	387,4 s	11,9 s	3,9 s

Tabelle 2.2: Verifikation von mehrstufigen Additionsnetzwerken. Angegeben ist die benötigte Zeit, um die jeweilige Eigenschaft des betrachteten Additionsnetzwerks mit Registern der angegebenen Bitbreite zu validieren.

#Bits	Multiplizierer Eigenschaft #6			Multiplizierer Eigenschaft #9		
	SAT	CIP	CIP/AP	SAT	CIP	CIP/AP
5	8,5 s	0,9 s	0,6 s	1534,6 s	> 1 h	0,9 s
10	> 1 h	3,1 s	2,4 s	> 1 h	> 1 h	3,9 s
15	> 1 h	7,7 s	6,3 s	> 1 h	> 1 h	12,5 s
20	> 1 h	19,6 s	15,1 s	> 1 h	> 1 h	29,0 s
25	> 1 h	34,4 s	27,2 s	> 1 h	> 1 h	55,1 s
30	> 1 h	64,9 s	49,9 s	> 1 h	> 1 h	103,4 s
35	> 1 h	97,0 s	76,3 s	> 1 h	> 1 h	161,0 s
40	> 1 h	158,2 s	122,3 s	> 1 h	> 1 h	258,7 s

Tabelle 2.3: Verifikation von mehrstufigen Multiplikationsnetzwerken. Angegeben ist die benötigte Zeit, um die jeweilige Eigenschaft des betrachteten Multiplikationsnetzwerks mit Registern der angegebenen Bitbreite zu validieren.

Im Berichtszeitraum konnten erhebliche Fortschritte bei der Lösung der Eigenschaftsverifikation erzielt werden. Tabellen 2.2 und 2.3 vergleichen anhand einer Schaltung für einen mehrstufigen Addierer bzw. Multiplizierer die traditionelle Technik des SAT-Lösens auf Gatter-Ebene (Spalte SAT) mit der am ZIB entwickelten Technik des CIP-Lösens auf Register-Transfer-Ebene (Spalte CIP). Von den von Infineon gelieferten Datensätzen wurden hier jeweils zwei gültige Eigenschaften ausgewählt und Schaltungen mit Registerbreiten zwischen 5 und 40 Bit evaluiert.

Es zeigt sich, dass durch das Ausnutzen der strukturellen Information auf Register-Transfer-Ebene eine erhebliche Zeitersparnis für die Eigenschaftsverifikation erzielt werden konnte. Insbesondere der Multiplizierer erweist sich für herkömmliche SAT-Techniken als außerordentlich schwierig. Mit CIP kann zumindest Eigenschaft #6 mit geringer Laufzeit auch für große Bitbreiten validiert werden.

Eine weitere Verbesserung konnte durch den Einsatz von algebraischen Preprocessing-Techniken (Spalte CIP/AP) erzielt werden. Dabei wird mit Hilfe eines Termersetzungssystems nach Äquivalenzen von Variablen oder Teilausdrücken innerhalb der betrachteten Schaltung gesucht, um so die Problemgröße zu reduzieren. Dies führte insbesondere beim Multiplizierer zu einer Problemvereinfachung, durch die selbst die für SAT-Löser am schwierigsten zu beweisende Eigenschaft #9 validiert werden konnte.

MIPLIB 2003

Bearbeitet von: Thorsten Koch, Tobias Achterberg

Kooperationspartner: Alexander Martin (Technische Universität Darmstadt)

Um den Bedarf der Forscher nach Zugriff auf interessante Gemischt-Ganzzahlige Lineare Programme (MIP, mixed integer program) zu bedienen, erzeugten R. E. Bixby, E. A. Boyd und R. R. Indovina 1992 die MIPLIB, eine Bibliothek elektronisch verfügbarer Probleminstanzen. Durch die Fortschritte bei den MIP-Lösern wurde es später notwendig, die Bibliothek zu überarbeiten, obsolet gewordene Instanzen zu entfernen und neue, schwierigere Instanzen hinzuzufügen. Dies wurde 1996 von R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal und M. W. P. Savelsbergh durchgeführt [8].

Die MIPLIB ist inzwischen zu einer Standard-Testbibliothek für den Vergleich von MIP-Lösern geworden.

In Absprache mit den bisherigen Betreuern ist die MIPLIB im Jahr 2003 an das ZIB verlegt worden und wird hier unter der neuen Adresse <http://miplib.zib.de> überarbeitet und betreut.

Inzwischen erfreut sich die „neue“ MIPLIB regen Zuspruchs und ist bereits in mehreren Veröffentlichungen zitiert worden.

SteinLib Testdata Library

Bearbeitet von: Thorsten Koch

Kooperationspartner: Technische Universität Darmstadt, Technische Universität Braunschweig

Das Steinerbaumproblem in Graphen lässt sich wie folgt formulieren: In einem Graphen $G = (V, E, c)$ mit einer Knotenmenge V , einer Kantenmenge E und Kantengewichten c_e sowie einer Menge $T \subseteq V$ von ausgezeichneten Terminals wird ein T aufspannender Subgraph von G 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.

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

Die von uns eingerichtete und im Internet abrufbare Bibliothek von Steinerbaumprobleminstanzen wird beständig aktualisiert und erweitert (<http://elib.zib.de/steinlib>).

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

Publikationen

- [1] T. Achterberg, *SCIP - a framework to integrate Constraint and Mixed Integer Programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [2] T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *Branching Rules Revisited*, Report 04-13, ZIB, 2004.

- [3] R. Borndörfer, *Aspects of Set Packing, Partitioning, and Covering*, Dissertation, TU Berlin, 1998.
- [4] A. Caprara und M. Fischetti, $\{0, 1/2\}$ -*Chvátal-Gomory cuts*, *Mathematical Programming* 74 (1996), 221–235.
- [5] A. Koster und A. Zymolka, *Stable multi-sets*, *Math. Meth. Oper. Res.* 56 (2002), 45–65.
- [6] A. Koster und A. Zymolka, *Polyhedral investigations on stable multi-sets*, Report 03–10, ZIB, 2003.
- [7] A. Martin, *Integer Programs with Block Structure*, Habilitationsschrift, TU Berlin, 1998.
- [8] MIPLIB 3.0, <http://miplib.zib.de/>, 2003.

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 nur 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 spielen *Echtzeit-Anforderungen*: Der Algorithmus muss innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern. Innerhalb dieses Schwerpunktes sind zwei Projekte des DFG-Forschungszentrums MATHEON angesiedelt.

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich die von Sleator und Tarjan [21] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [4, 8]). 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 eines 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 [2, 5, 6], dem wir uns im Projekt *Kombinatorische Online-Planung* widmen.

Ein wichtiges Anwendungsgebiet der Online-Optimierung sind Planungsprobleme im Transportwesen und in der innerbetrieblichen Logistik. Transportsysteme sind in der Regel nicht im Voraus (offline) zu optimieren, da zukünftige Transportaufträge beispielsweise für Lastenaufzüge oder für Bediengeräte von Hochregallagern nicht bekannt und ausfallbedingte Staus nur selten rechtzeitig vorausszusehen sind. Lange Rechenzeiten verringern den Durchsatz im System, so dass verwendete Online-Algorithmen insbesondere auch Echtzeit-Anforderungen genügen müssen.

Logistische Systeme sind oft modular aufgebaut. Es ist manchmal möglich, die Gütegarantien für die einzelnen Komponenten des Systems auf das Gesamtsystem zu übertragen. Dies wird im Projekt *Modellierung, Analyse und Simulation von modularen Echtzeit-Systemen* untersucht.

Online-Transportaufgaben mit Echtzeit-Anforderungen treten auch bei der Planung von Einsatzfahrzeugen auf, wie etwa bei der Zuordnung von Pannenhelfern zu liegen gebliebenen Kraftfahrzeugen. Da künftige Pannenorte im Allgemeinen unbekannt sind, muss eine Planung auf Basis bekannter Daten strategisch gute Entscheidungen liefern, um Engpässe in der Zukunft zu vermeiden (siehe Projekte *Online-Disposition von Fahrzeugen*).

Ein möglicher Ansatz zur Lösung dieser Probleme ist die Verwendung von Reoptimierungsalgorithmen. Bei jeder Änderung des Systemzustands wird ein Offline-Optimierungsproblem mit den zu diesem Zeitpunkt vorliegenden Daten gelöst. Im Projekt *Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen* hat sich die Überlegenheit von exakten Reoptimierungsalgorithmen nicht nur gegenüber dem in der Praxis häufig verwendeten Verfahren FIFO, sondern auch gegenüber anderen heuristisch reoptimierenden Online-Algorithmen gezeigt.

Mit dem Ziel, ein mathematisches Verfahren zur allgemeinen Identifizierung geeigneter Offline-Optimierungsprobleme zur Reoptimierung zu entwickeln, werden im Projekt *Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung* ihre speziellen Eigenschaften erforscht.

Kombinatorische Online-Planung

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

Förderung: DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“

Das Standardwerkzeug zur theoretischen Bewertung von Online-Algorithmen, die *kompetitive Analyse* [21], liefert in vielen relevanten Fällen sehr pessimistische Ergebnisse. Insbesondere tritt der Fall auf, dass offensichtlich unterschiedlich gute Online-Algorithmen gleich schlecht abschneiden [17].

Der Grund hierfür ist, dass es in solchen Fällen für *jeden* Online-Algorithmus eine entsprechende *worst-case*-Eingabe gibt, auf der der Online-Algorithmus, verglichen mit einem optimalen Offline-Algorithmus, schlecht abschneidet. Zur Konstruktion dieser Eingabe wird Wissen über die Funktionsweise des Online-Algorithmus benutzt.

Um trotzdem zu sinnvollen Aussagen zu gelangen, führten Ben-David et al. in [3] die *randomisierte kompetitive Analyse* ein, d. h. sie betrachteten *randomisierte* Online-Algorithmen. Dieser Ansatz hat sich als eine Alternative zur herkömmlichen kompetitiven Analyse etabliert (siehe [4, 8]). Der Vorteil besteht darin, dass die Reaktion des Online-Algorithmus auf eine spezielle Eingabe nicht von vornherein feststeht und so das „schlechte“ Verhalten auf einer *worst-case*-Eingabe nur *ein* mögliches Verhalten ist.

Neben solchen randomisierten Online-Algorithmen wird in diesem Projekt auch der „umgekehrte“ Ansatz untersucht, nämlich das Verhalten von deterministischen Online-Algorithmen bei *zufälligen* Eingaben. Dem liegt die Überlegung zugrunde, dass realistische Instanzen nicht konstruiert werden, um Online-Algorithmen schlecht abschneiden zu lassen, sondern dass diese Instanzen sich aus äußeren, ungewissen Ereignissen ergeben. Das Interesse gilt also nicht dem schlechtesten Fall, sondern dem *Durchschnittsfall* (average-case-Analyse).

In gewisser Weise schränkt man durch die Vorgabe eines Zufallsmodells für Eingaben den Raum möglicher Eingaben ein. Die Einschränkung des Eingabenraums zur Abschwächung des „worst-case Instanzen erzeugenden Gegners“ ist ein anderer möglicher Ansatz zur Verbesserung von Kompetitivitätsaussagen.

In [14] wurde eine erste *probabilistische kompetitive Analyse* des Online-Dial-a-Ride-Problems auf Bäumen durchgeführt. Das Dial-a-Ride-Problem DARP besteht aus einem Graphen $G = (V, E)$ (hier: ein Baum) und einer Menge von Auftragsbögen A . Gesucht ist eine möglichst kurze Tour über Kanten von G , die die Aufträge aus A ausführt. Im Online-Dial-a-Ride-Problem OLDARP hat jeder Auftrag zusätzlich eine *Ankunftszeit*. Aufgabe eines Online-Algorithmus ist es, einen *aktuellen Abarbeitungsplan* zu verwalten und auszuführen, der nur bereits bekannte Aufträge enthält und die insgesamt gefahrene Strecke minimiert.

In unserem Zufallsmodell werden die Auftragsbögen wiederholt unabhängig gemäß einer Verteilung $(p_{uv})_{u,v \in V}$ auf den Bögen gezogen, wobei wir annehmen, dass die Verteilung symmetrisch ist, d. h. es gilt $p_{uv} = p_{vu}$ für alle $u, v \in V$. In Analogie zur Warteschlangentheorie werden die Ankunftszeiten der Aufträge über exponentialverteilte Zwischenankunftszeiten modelliert. Unter der Annahme hoher Last, also schneller Ankunft von Aufträgen, konnten wir zeigen, dass ein bestimmter polynomieller Online-Algorithmus *probabilistisch* $(1 + o(1))$ -*kompetitiv* ist. Dies bedeutet, dass für genügend große Anzahlen von Aufträgen der Quotient der vom Online-Algorithmus und der vom optimalen Offline-Algorithmus erzeugten Kosten mit beliebig großer Wahrscheinlichkeit beliebig nah an Eins liegt. Dieses Ergebnis geht über normale Durchschnittsfallanalyse weit hinaus.

Das Resultat für Bäume kann mit modernen Approximationstechniken auf beliebige Metriken übertragen werden.

Modellierung, Analyse und Simulation von modularen Echtzeit-Systemen

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Sven O. Krumke, Tjark Vredeveld

Kooperationspartner: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte C5, C6

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt C3

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, 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.

Im letzten Jahr wurde ein Modell für Stochastisches Online-Scheduling entwickelt [20]. In diesem Modell hat der Scheduler kein Wissen über künftige Aufträge (Online-Aspekt) und, sobald ein Auftrag bereitgestellt ist, ist von seiner Bearbeitungszeit nur die Wahrscheinlichkeitsverteilung bekannt (stochastisches Scheduling). Für die Zielfunktion, die gewichteten Fertigstellungszeiten zu minimieren, konnten wir die Gütegarantie für das Problem mit einer einfachen Maschine auf das Problem mit mehreren Maschinen übertragen.

Außerdem haben wir – in Zusammenarbeit mit Projekt C5 und C6 des DFG-Forschungszentrums MATHEON – für das Problem der Online-Terminplanung Gütegarantien zeigen können. Die Untersuchung dieses neuen Problemtyps wurde initiiert durch eine Kooperation mit „Hermes Technischer Kundendienst“ (HTK). Das Problem besteht aus zwei Phasen. In der ersten Phase erhält die Telefonzentrale von HTK Aufträge und jedem dieser Aufträge muss unwiderruflich ein bestimmter Termin zugeordnet werden. Sobald alle Aufträge für einen Tag bekannt sind, werden sie verschiedenen Technikertouren optimal zugeordnet. Das Problem besteht darin, den Aufträgen solche Termine zuzuweisen, aus denen möglichst kostengünstige Technikereinsatzpläne resultieren.

Bei der dynamischen Konfiguration optischer Kommunikationsnetze treffen im Zeitablauf Verbindungsanfragen ein. Eine Verbindungsanfrage gibt dabei einen Start- und einen Zielknoten, die Anzahl der dazwischen benötigten Lichtwege und eine Dauer 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 entsprechenden Lichtwegen für die gewünschte Dauer zur Verfügung stellen. Hierbei dürfen bestehende Lichtwege nicht geändert werden, und es muss die Wellenlängenkonfliktbedingung eingehalten werden. Ziel ist es, die Gesamtzahl der angenommenen Verbindungsanfragen zu maximieren. Der Online-Charakter des Problems zeigt sich darin, dass keinerlei Informationen über zukünftige Anfragen bekannt sind, wenn die Entscheidung über die aktuelle Verbindungsanfrage getroffen werden muss. In [16, 22] sind Simulationsstudien für die dynamische Konfiguration optischer Netze durchgeführt worden. Einer der Algorithmen, der die Lichtwege über kürzeste Wege plant, ergibt die besten Resultate. Die spezielle Ausgestaltung (tie-breaker) ist entscheidend für die Qualität der Lösung.

Dieses Problem hat eine natürliche modulare Struktur: Man hat keine vollständige Übersicht über das ganze Netz. Die Knoten müssen auf lokalen Informationen basierend über das Routing der Lichtwege entscheiden. Barz [1] hat von den in [16, 22] genannten Algorithmen verteilte Versionen abgeleitet und die Qualität dieser verteilten Algorithmen durch experimentelle Evaluierung bewertet.

Das MATHEON-Projekt C3 ist am 31. 12. 2004 wegen der Berufung eines der Projektleiter und des Projektmitarbeiters eingestellt worden.

Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung

Bearbeitet von: Martin Grötschel, Philipp Friese, Jörg Rambau, Andreas Tuchscherer

Kooperationspartner: eCom Logistik (Berlin), Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e. V. (ADAC), Hermes Technischer Kundendienst, DFG-Graduiertenkolleg „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte B7, B11, C3, C5, C7, F4

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt C6

Viele logistische Systeme in der Produktionsplanung erfordern eine verlässliche Online-Steuerung. Ein vielversprechendes Konzept in der Entwicklung von Online-Algorithmen ist *Reoptimierung*. 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 un-

ter den gleichen Nebenbedingungen dieselbe Zielfunktion wie im Online-Problem, benutzt aber nur die jeweils verfügbaren Input-Daten. Dieses kann jedoch zu unerwünschten Ergebnissen führen [13].

Ziel dieses Projektes ist es zu untersuchen, 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.

Eines der im Berichtszeitraum betrachteten Beispielprobleme basiert auf der Einsatzplanung von Service-Technikern eines Kundendienstes (ehemaliges Projekt mit Hermes Technischer Kundendienst). Diese verläuft in zwei Schritten. Noch während des Kundenanrufs muss ein Termin vereinbart werden. Anschließend erfolgt tageweise die Technikereinsatzplanung zum Bedienen aller Termine für einen gegebenen Tag. Das Optimierungsergebnis hängt in der Regel wesentlich von den vorher vergebenen Terminen ab. Das Ziel besteht darin, Termine so zu vergeben, dass die für diese Termine optimalen Technikereinsatzpläne möglichst kostengünstig sind.

Für Probleme dieser Art, die aus einer Online-Terminplanung und der nachgelagerten Optimierung eines beliebigen Offline-Problems bestehen, haben wir einerseits verschiedene Online-Algorithmen bei unterschiedlichen nachgelagerten Offline-Problemen mittels kompetitiver Analyse untersucht. Andererseits haben wir eine Formulierung als Markov-Entscheidungsprozess (MDP) entwickelt, wodurch insbesondere gegebene Wahrscheinlichkeitsverteilungen über die zukünftigen Ereignisse berücksichtigt werden können. Über eine Formulierung als Lineares Programm lassen sich im Erwartungswert optimale Strategien in MDPs prinzipiell berechnen. Aufgrund der sehr großen Zahl von Zuständen bei realistischen Problemen kann das zugehörige LP jedoch nicht direkt gelöst werden. Daher haben wir ein neues, auf Spaltengenerierung basierendes Verfahren (*Relative Politikevaluierung*) entwickelt und implementiert, das es ermöglicht, für eine gegebene (oder eine unbekannt optimale) Strategie die erwarteten Kosten in einem Zustand beidseitig zu approximieren und damit eine Schranke für den relativen Fehler der Strategie liefert. Auf theoretischer Seite konnten wir zeigen, dass die Anzahl benötigter Variablen neben der angestrebten Approximationsgüte nur von der Anzahl zulässiger Steuerungen und möglicher Nachfolgezustände sowie dem Diskont-Faktor abhängt, nicht jedoch von der Gesamtzahl an Zuständen im MDP. Abbildung 2.44 zeigt den Verlauf der oberen und unteren Schranke der erwarteten Kosten einer optimalen und einer gegebenen (sehr guten) Strategie für einen Zustand in Abhängigkeit der Anzahl von Variablen im LP bei nachgelagertem Bin-Packing. Im zugehörigen MDP gibt es insgesamt mehr als 1,2 Milliarden Zustände. Um die Kosten mit einer Ungenauigkeit von höchstens 10% zu approximieren, werden für die gegebene Strategie weniger als 1.000 Variablen benötigt. Für eine optimale Strategie sind es gut 2.600.

Eine weitere Anwendung, in der wir Erfahrungen mit der Entwicklung von Reoptimierungsalgorithmen unter Realzeitanforderungen gemacht haben, ist die Steuerung von Fahrstuhlsystemen (vgl. Projekt *Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*).

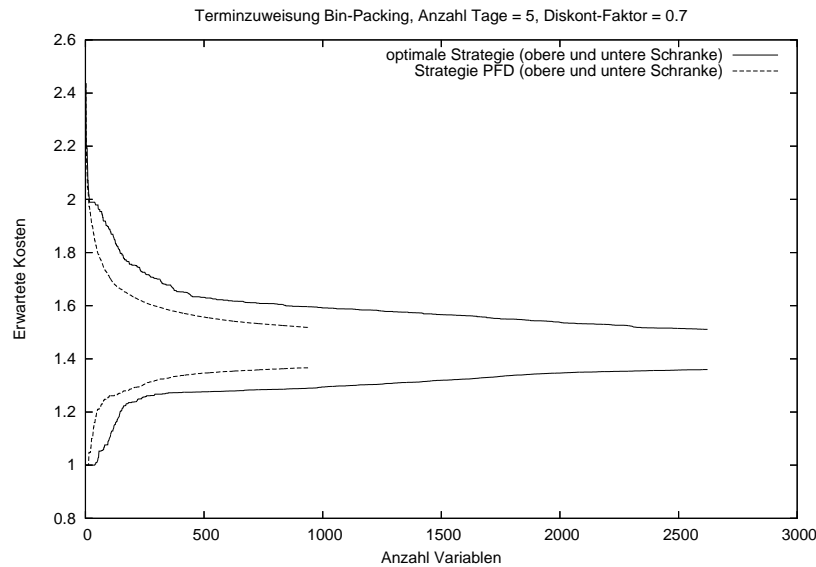


ABBILDUNG 2.44: Verlauf der Kostenapproximation für eine optimale und eine gegebene Strategie in einem MDP mit mehr als 1,2 Milliarden Zuständen.

Online-Disposition von Fahrzeugen

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

Kooperationspartner: Allgemeiner Deutscher Automobil-Club e. V. (ADAC), Intergraph Public Safety (IPS)

Das Ziel dieses Projektes ist, ein Online-Dispatching-Verfahren zu entwickeln, das bei der Berechnung einer *Echtzeit*-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 Hilfezentralen werden Pannemeldungen angenommen und über die Disposition der Einsatzmittel (sowohl der ADAC-Flotte als auch externer Service-Partner) entschieden. Ausgehend von Informationen über Position und Status der aktuellen Aufträge und der ADAC-Fahrzeuge soll ein Einsatzplan gefunden werden, der eine gute Service-Qualität garantiert (d. h. Wartezeiten von 20 bis 60 Minuten, je nach Lastzustand) und gleichzeitig möglichst geringe Betriebskosten verursacht.

Diese Aufgabe ist aus drei Gründen schwierig: Erstens ist die Berechnung eines Einsatzplans mit global guter Qualität aus mathematischer Sicht ein komplexes Problem. Zweitens muss die Berechnung in *Echtzeit* erfolgen. Drittens 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.

Intensive Simulationen zeigten die Eignung unseres Verfahrens [12, 19]. Dieses wird seit Ende 2002 im praktischen Betrieb durch den ADAC eingesetzt. In der Praxis ergab sich jedoch ein viel höheres Auftragsaufkommen als es die bislang untersuchten Daten gezeigt hatten. Hinzu kamen Probleme mit der Einbindung externer Service-Partner, die in unserem bisherigen Modell eine wichtige Rolle spielten.

Dies führte Ende 2003 zur Entwicklung von *Hochlastvarianten* unseres Verfahrens, die ohne Partner gute Lösungen erzielen sollten. Kernidee war dabei, dass bei hohem Auftragsaufkommen eine langfristige Planung nicht besonders sinnvoll ist, da sich die Situation in der nächsten Zeit stark ändern kann. Daher bieten die Hochlastvarianten die Möglichkeit, *vorerst* auf die Einplanung einzelner (ungünstig einplanbarer) Aufträge zu verzichten, um so kurzfristig möglichst viele günstig gelegene Aufträge abzuarbeiten. Die Hochlastvarianten haben wir mittels unseres Simulationssystems evaluiert und klare Unterschiede feststellen können. Aufgrund dieser Ergebnisse haben wir dem ADAC die beste Variante empfohlen, die zwischenzeitlich auch von IPS implementiert wurde.

Unsere Simulationen zeigten auch einen anderen überraschenden Zusammenhang: Das zeitweise Nichtberücksichtigen von Aufträgen kann als „Fehler“ bezüglich des ursprünglichen Modells angesehen werden, mit dem man sich kürzere Rechenzeiten erkaufte. Insofern ist die Frage interessant, wie groß dieser Fehler sein darf, um trotzdem gute Ergebnisse zu erzielen. Es stellte sich heraus, dass es sich auszahlt, den Fehler möglichst gering zu halten, d. h. möglichst viele Aufträge zu berücksichtigen [15]. Das ist deshalb überraschend, weil dieser Fehler bezüglich *unvollständiger Information* gemacht wird und man erwarten könnte, dass er durch die tatsächliche Entwicklung nivelliert wird. In der Tat wurde dies in der Literatur behauptet; unsere Ergebnisse sind ein experimentelles Indiz dafür, dass diese Aussage nicht uneingeschränkt gilt.

Parallel zu den Hochlastvarianten untersuchten wir weitere Verbesserungen unseres Verfahrens. In einer Diplomarbeit [7] wurden alternative Heuristiken sowie Verfahren zum Runden der LP-Lösung getestet, die allerdings keine Verbesserung brachten.

Ein anderer Diplomand [23] implementierte fortgeschrittene Algorithmen zur Berechnung unterer Schranken und zur Spaltengenerierung für das Offline-Problem. Diese neuen Algorithmen brachten beachtliche Geschwindigkeitssteigerungen, die uns vor allem in der a-posteriori-Analyse von großem Nutzen sein werden. Insbesondere sind wir jetzt in der Lage, untere Schranken für Offline-Lösungen mit einem Zeithorizont von mehreren Stunden zu berechnen.

Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen

Bearbeitet von: Philipp Friese, Jörg Rambau

Kooperationspartner: eCom Logistik (Berlin), DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt C6

Förderung: DFG-Graduiertenkolleg „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“

Ein wichtiger Bestandteil in der innerbetrieblichen Logistik, z. B. im Versandlager der Firma eCom Logistik (Herlitz PBS AG) in Falkensee nahe Berlin, sind Lastaufzugsysteme, z. B. für Paletten. Die Aufzüge bei solchen Systemen operieren mit *1-Kapazität* (Einzelplatz-Aufzüge), d. h. pro Transportfahrt kann jeweils nur ein Objekt transportiert werden, und *ohne Präemption*, d. h. eine begonnene Transportfahrt endet stets in der Zieletage ohne Zwischenstops. Zur Steuerung derartiger Systeme werden in der Praxis oft „Standard-Steuerungen“ wie FIFO verwendet, d. h. Aufträge werden in der Reihenfolge ihres Auftretens abgearbeitet. Jeder Steuerung ist dabei stets die Zieletage eines jeden Auftrags im Voraus bekannt (Steuerung mit Zielauswahl).

Um Überlastungen in Spitzenzeiten zu vermeiden, werden die Aufzugssysteme meist überdimensioniert geplant. Durch Einsatz einer *mathematisch optimierten Steuerung* wird die Leistungsfähigkeit solcher Transportsysteme auf signifikante Weise beeinflusst (siehe auch [11]). Ein derart gesteuertes System kann bei gleichen Anforderungen i. d. R. kleiner dimensioniert werden (vgl. Abbildung 2.45).

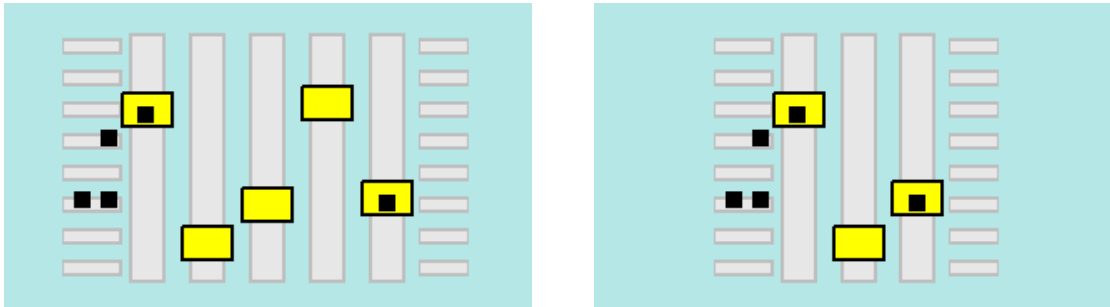


ABBILDUNG 2.45: Lastaufzugssysteme mit Einzelplatz-Aufzügen. Durch Verwendung einer mathematisch optimierten Steuerung (rechts) lassen sich Aufzüge gegenüber einer Standard-Steuerung (links) einsparen.

Zwei Aspekte erschweren die Steuerung:

Online-Aspekt. Das zukünftige Auftreten von Aufträgen, meist sogar deren stochastische Verteilung, ist unbekannt.

Echtzeit-Aspekt. Alle Berechnungen zur Steuerung müssen „schnell“ erfolgen. Bei Aufzugssystemen werden Antworten zur Steuerung nach maximal *einer Sekunde* erwartet.

Eine spezielle Klasse von Online-Algorithmen zur mathematisch optimierten Steuerung bilden die *Reoptimierungsalgorithmen*. Bei jeder Änderung des Systemzustandes wird ein Offline-Optimierungsproblem mit den bis zu diesem Zeitpunkt bekannten Daten konstruiert und gelöst. Diese Lösung wird dann bis zur nächsten Änderung des Systemzustandes verwendet.

Mittlerweile können wir idealisierte Palettenaufzugssysteme (siehe Abbildung 2.46) mit mehreren Aufzügen mit Hilfe eines integrierten Reoptimierungsalgorithmus in Echtzeit steuern [9]. Integriert bedeutet dabei, dass der Algorithmus die Zuordnung (von Aufträgen zu Aufzügen) und die Abarbeitungsreihenfolge (von Aufträgen durch einen Aufzug) gleichzeitig betrachtet.

In ausgiebigen Simulationsstudien konnten wir experimentell nachweisen, dass durch den Einsatz von Reoptimierungsalgorithmen eine Leistungsverbesserung gegenüber Standard-Verfahren bei gleichbleibender Kapazität erreicht wird. Des Weiteren konnten wir nachweisen, dass die Systeme dadurch ohne Leistungseinbußen kleiner dimensioniert werden können. Für eine ausführliche Zusammenstellung der gesammelten Resultate sei an dieser Stelle auf [10] verwiesen. In weiteren Untersuchungen, sowohl experimentell als auch theoretisch, konnten wir mittels mathematischer Evaluierungsmethoden Gütegarantien für Steuerungen berechnen (vgl. dazu [18]).

Die bisherigen Untersuchungen für idealisierte Aufzugssysteme sollen nun auf das reale System der Firma eCom Logistik ausgeweitet werden.

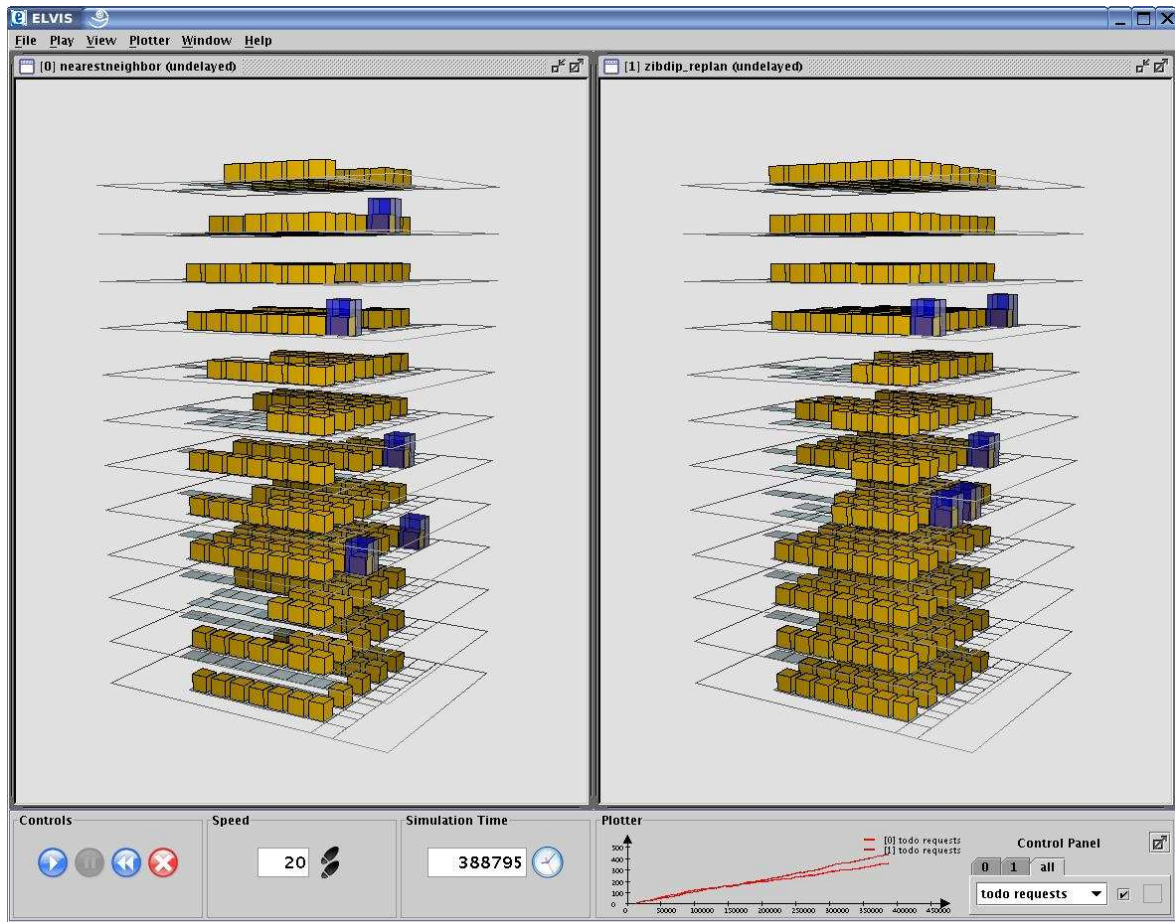


ABBILDUNG 2.46: Zwei Lastaufzugssysteme im Vergleich. Die Darstellung ist der am ZIB entwickelten Visualisierung ELVIS des Simulationssystems entnommen.

Publikationen

- [1] M. B. Barz, *Verteilte Algorithmen zur dynamischen Konfiguration optischer Netze*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2004.
- [2] L. Becchetti, S. Leonardi, A. Marchetti-Spaccamela, G. Schäfer und T. Vredeveld, *Average case and smoothed competitive analysis for the multi-level feedback algorithm*, Proceedings of the 44th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS), 2003, 462–471, erhältlich als Report 03-14, ZIB, 2003.
- [3] S. Ben-David, A. Borodin, R. M. Karp, G. Tardos und A. Wigderson, *On the power of randomization in on-line algorithms*, *Algorithmica* **11** (1994), 2–14.
- [4] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.

-
- [5] A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *A heuristic for the stacker crane problem on trees which is almost surely exact*, Proceedings of the 14th International Symposium on Algorithms and Computation, LNCS 2906, Springer, 2003, 605–614.
- [6] A. Coja-Oghlan, 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, 48–50, erhältlich als Report 03-12, ZIB, 2003.
- [7] I. Dischke, *Disposition von Einsatzfahrzeugen: Startheuristiken, Branching-Regeln und Rundungstechniken*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2004.
- [8] A. Fiat und G. J. Woeginger (Hrsg.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [9] P. Friese, *Echtzeitsteuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2003.
- [10] P. Friese und J. Rambau, *Online-Optimization of Multi-Elevator Transport Systems with Reoptimization Algorithms based on Set-Partitioning Models*, Report 05-03, ZIB, 2005, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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, 137–149.
- [14] B. Hiller, *Bad guys are rare: Probabilistic analysis of an elementary Dial-a-Ride problem*, 2004, Diplomarbeit TU Ilmenau, ZIB.
- [15] B. Hiller, S. O. Krumke und J. Rambau, *Reoptimization gaps versus model errors in online-dispatching of service units for ADAC*, Report 04-17, ZIB, 2004, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [16] R. Hülsermann, M. Jäger, S. O. Krumke, D. Poensgen, 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, 293–312, Kluwer Academic Press, 2003.
- [17] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bincoloring*, Proceedings of the 9th Annual European Symposium on Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, 74–84.

- [18] 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.
- [19] 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 on Algorithms, Proceedings (R. H. Möhring und R. Raman, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2461, Springer, 2002.
- [20] N. Megow, M. Uetz und T. Vredeveld, *Stochastic online scheduling on parallel machines*, Tagungsband des “2nd Workshop on Approximation and Online Algorithms (WAOA 2004)” (G. Persiano und R. Solis-Oba, Hrsg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3351, Springer, 2005, 167–180.
- [21] 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.
- [22] A. Tuchscherer, *Dynamical configuration of transparent optical telecommunication networks*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2003.
- [23] S. Westphal, *Lower bounds and quality guarantees for online-dispatching*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2004.

2.2.12 Verkehr

Am ZIB hat sich im Bereich Verkehr eine große Bandbreite an Projekten entwickelt. Die in den Projekten zur Fahrzeugumlauf- und Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr untersuchten Methoden zur Lösung der auftretenden sehr großen Set-Partitioning Probleme werden im Projekt *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* kombiniert und weiterentwickelt; hierdurch wird der Anwendungsbereich der operativen Planung erweitert. Im Berichtsjahr wurde die zugehörige Implementierung verstärkt in der Praxis eingesetzt.

Insbesondere die Methoden der Dienstplanung konnten erfolgreich in einem Pilotprojekt *Airline Crew Scheduling* angepasst werden, z. B. Lagrange-basierte Pfadsuchtechniken zur Behandlung von Base Constraints. Mit diesem Projekt versucht das ZIB, auch in der Personalplanung im Flugverkehr tätig zu werden. Wir hoffen, dass sich daraus eine längerfristige Zusammenarbeit mit der Lufthansa Systems Berlin GmbH entwickelt.

Weiterhin werden die der operativen Planung vorgelagerten Probleme der *strategischen Planung* untersucht. Hier wurden zwei Teilprobleme untersucht. Zum einen die Linienplanung, indem Linienwege und -frequenzen in einem Nahverkehrsnetz optimiert werden. Zum anderen wurde das Preisplanungsproblem untersucht. Hier geht es um die optimale Berechnung von Preisen, so dass die Einnahmen eines Verkehrsunternehmens maximiert werden, wobei die Nachfrage vom Preis abhängt.

Das Projekt *Trassenbörse* untersucht die Planung des Schienenverkehrs für konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen. Hierdurch werden auch Markt Aspekte im Verkehr behandelt.

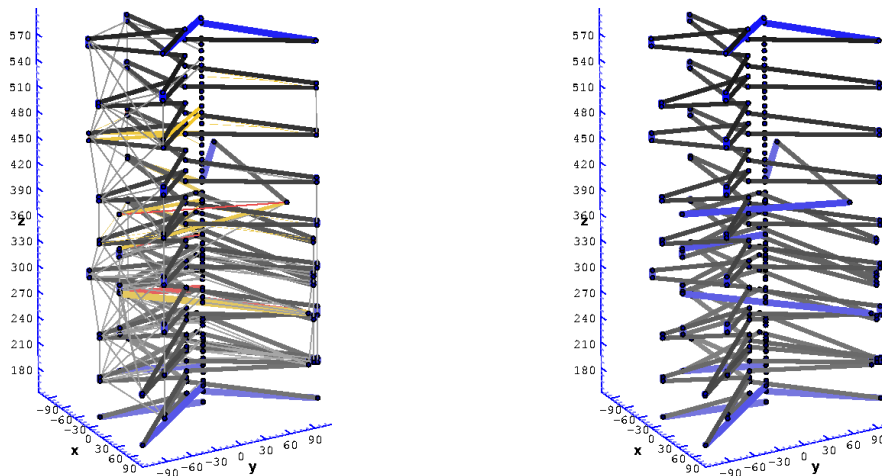


ABBILDUNG 2.47: Integrierte Planung. Die xy -Ebene entspricht den geographischen Positionen und die z -Achse der Zeit. *Links*: Planungsgraph dreier Buslinien der RVB. *Rechts*: Lösung mit sechs Diensten.

Eine Verallgemeinerung des klassischen Vehicle-Routing-Problems wurde im Projekt *Vehicle Routing mit Heterogener Flotte* untersucht. Hier ging es vor allem um die Entwicklung und Evaluierung von Lösungsmethoden für praxisnahe Instanzen des Vehicle-Routing-Problems. Schließlich wurde das Projekt *Management verteilter Lager* abgeschlossen, in dem ein Transportproblem im Verkehr mit unsicheren (stochastischen) Daten untersucht wurde.

Integrierte Umlauf- und Dienstplanung

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel, Steffen Weider

Kooperationspartner: IVU Traffic Technologies AG (Berlin); Mentz Datenverarbeitung GmbH (München); Regensburger Verkehrsbetriebe GmbH (Regensburg); DB Stadtverkehr GmbH (Berlin); Löbel, Borndörfer & Weider GbR

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Wichtige Teilschritte der operativen Planung von Verkehrsbetrieben sind die Fahr- oder Umlaufplanung und die Dienstplanung [6]. Die meisten Verkehrsbetriebe planen diese Teilschritte sequentiell. Sind jedoch nur wenig Ablösemöglichkeiten oder Pausenorte für die Fahrer vorhanden, kann diese Vorgehensweise zu Problemen führen, da Dienste aufgrund gesetzlicher Vorschriften nach einer gewissen Lenk- oder Arbeitszeit durch Pausen unterbrochen oder beendet werden müssen.

Unser Verfahren zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung beruht auf einer Modellierung des Problems als eine Koppelung der ganzzahligen linearen Programme für die beiden Einzelprobleme, dies ist detailliert in [4] beschrieben. Ziel der Optimierung ist, einen Mix von Fahrzeug- und Dienstkosten zu minimieren, die von der Anzahl und Art der Fahrzeuge und Dienste, von den angewendeten Pausenregeln, der Arbeitszeit und vielen anderen Faktoren abhängen können (siehe Abbildung 2.47).

Im Berichtszeitraum haben wir abschließende Testrechnungen für die Regensburger Verkehrsbetriebe (RVB) durchgeführt. Dieser mittelgroße Verkehrsbetrieb ist überwiegend städtisch

geprägt. Das Liniennetz des RVB ist im Wesentlichen sternförmig. Ablösestellen für die Fahrer stehen nur an vier verschiedenen Orten an den Schnittstellen der Linien zur Verfügung. Diese Orte liegen alle in der Nähe des Hauptbahnhofes, der nicht weit vom Betriebshof entfernt ist. Durch diese Struktur ist die reine sequentielle Optimierung von Umlauf- und Dienstplan nicht sinnvoll und führte in unseren Tests zu schlechteren Ergebnissen als die Referenzlösung. Vor allem war in der sequentiellen Planung im Vergleich zur integrierten Planung die Anzahl der notwendigen Fahrzeugwechsel von Fahrern höher. In vielen Betrieben sind solche Fahrzeugwechsel unerwünscht.

Die Anwendung unseres Verfahrens konnte im Vergleich zur Referenzlösung die Anzahl der Dienste um ca. 2–3%, die Gesamtarbeitszeit um ca. 5% und die Zeit, die die Fahrzeuge außerhalb des Betriebshofes verbringen, um ca. 4% senken.

Details zu älteren Rechenergebnissen können in [3] gefunden werden, die neuen Ergebnisse haben wir auf der CASPT 2004 in San Diego präsentiert und in [4] publiziert.

Zusätzlich wurde im Berichtszeitraum eine Studie für die DB Stadtverkehr GmbH durchgeführt, in der die Einsetzbarkeit von integrierter Planung für den regionalen Busverkehr untersucht wurde. Dazu wurden mehrere Betriebshöfe optimiert, welche bis zu 50 zu verplanende Dienste und Fahrzeuge je Betriebstag enthalten. Sequentielle Planung für diese Betriebshöfe führte zu keinem fahrbaren Ergebnis, da in diesem Fall die kostenminimalen Umläufe wegen fehlender Pausenmöglichkeiten und Ablösestellen für Fahrer nicht mit Diensten belegt werden konnten. Die integrierte Planung jedoch scheint signifikante Einsparmöglichkeiten gegenüber manueller Planung aufzuweisen. In diesem Zusammenhang wurde auch das Potential einer gleichzeitigen Planung der fremdzuvergebenden und in Eigenregie betriebenen Fahrten untersucht. Die eigenen Dienste sollten hierbei einen möglichst großen Planbauwirkungsgrad haben. Die fremdzuvergebenden Fahrtenketten sollten kostenminimal sein, wobei als Kosten ein Mix aus fixen Kosten pro Fahrtenkette und variablen Kosten je gefahrenem Kilometer angenommen wurden. Es wurden Szenarien mit bis zu ungefähr 70 Fahrzeugen und 100 Diensten gerechnet. Dabei konnte sowohl der Planbauwirkungsgrad erhöht als auch die Kosten der Fremdvergabe gesenkt werden. Eine Evaluierung dieser Ergebnisse durch das Verkehrsunternehmen wurde noch nicht vorgenommen.

Airline Crew Scheduling

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Löbel, Thomas Schlechte, Steffen Weider

Kooperationspartner: Lufthansa Systems Berlin GmbH

Förderung: Lufthansa Systems Berlin GmbH; Löbel, Borndörfer & Weider GbR

In den Planungsprozessen von Fluggesellschaften finden die Techniken der diskreten Optimierung seit Jahrzehnten zahlreiche Anwendungen. Ein in der Beschreibung einfaches, in der Lösbarkeit jedoch sehr schwieriges und komplexes Problem von enormer ökonomischer Relevanz ist die Personalplanung, im Fachjargon auch *Airline Crew Scheduling* genannt.

Die Aufgabe besteht darin, *Pairings* zu generieren, d. h. zulässige Abfolgen von Arbeitstätigkeiten der Besatzungsmitglieder, so dass alle geplanten Flüge einer Fluggesellschaft genau von einer Crew bedient und die Kosten des Gesamtplanes minimiert werden. Die Zulässigkeit eines *Pairings* unterliegt dabei komplizierten gesetzlichen, betrieblichen und gewerkschaftlichen Regeln. Aber auch der Plan als Ganzes unterliegt Restriktionen, beispielsweise müssen die Kapazitäten für die Verfügbarkeit von Besatzungen der Fluggesellschaften an einzelnen Heimatbasen eingehalten werden, sogenannte Base Constraints.

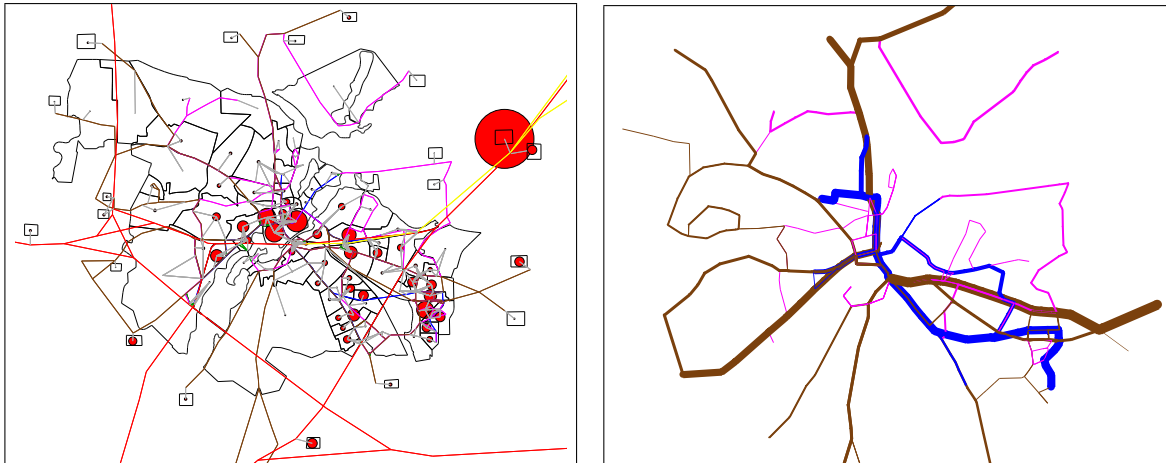


ABBILDUNG 2.48: Liniensplanung. *Links*: Bestehende Bezirke, Liniennetz und Quellenstärke in Potsdam. *Rechts*: Berechnetes Liniennetz. Die Liniendicken sind jeweils proportional zur Frequenz der entsprechenden Linien.

In diesem Projekt entwickeln wir auf Set-Covering/Partitioning-Modellen basierende Column-Generation-Optimierungsverfahren zur Pairing-Optimierung. Kern des Verfahrens sind spezielle Lagrange-Pfadsuchtechniken zur Pairingerzeugung, mit denen auch große und komplexe Szenarien mit mehreren Tausend Flügen und Dutzenden von Base Constraints für einen festen Besatzungstyp gelöst werden können.

Im Berichtszeitraum haben wir an der Übertragung ähnlicher Verfahren, die wir für die Dienstplanung im ÖPNV entwickelt haben [2, 3], auf den Luftverkehr gearbeitet. Es wurde bereits ein Prototyp entwickelt und erfolgreich getestet.

Langfristiges Ziel dieses Projektes ist, von der sequentiellen Planung der Besatzungsmitglieder, d. h. vereinfacht zuerst Kapitän, dann Copilot und zuletzt die Kabinencrew, hin zu einer alle Freiheitsgrade nutzenden integrierten Pairing-Optimierung zu gelangen. Erster Schritt auf dem Weg ist die Untersuchung von sogenannten Anpassungsoptimierungen mit Hilfe von Base Constraints.

Die Integration unseres Verfahrens in das Planungssystem NetLine/Crew der Lufthansa Systems Berlin GmbH ist ein weiteres Projektziel.

Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Marc Pfetsch

Kooperationspartner: Havelbus Verkehrsgesellschaft mbH; IVU Traffic Technologies AG; Lufthansa Systems AG; ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH

Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B1

In der strategischen Planung sollen die Infrastruktur und das Angebot in einem Nahverkehrssystem geplant werden. Ein üblicher Ablauf umfasst nacheinander die Planung des Netzes, des Linienvlaufes, der Frequenzen der Linien und des Fahrplans; daneben tritt die Planung der Preise.

Ziel dieses Projekts ist, mathematische Optimierungsverfahren für diese Probleme zu entwickeln, wie diese im Bereich der operativen Planung schon seit längerem eingesetzt werden.

Im Berichtszeitraum haben wir uns auf die Planung der *Linien* und der *Preise* konzentriert. In der *Linienplanung* sollen Linien (d. h. Linienverlauf und Frequenz) in einem gegebenen Netz geplant werden, so dass ein gegebenes Passagieraufkommen transportiert werden kann, siehe Abbildung 2.48. Hier muss eine Kosten-Nutzen-Abwägung zwischen Passagierinteressen (d. h. hauptsächlich eine geringe Fahrzeit) und Kosten vorgenommen werden.

Wir haben ein wegbasiertes Mehrgüterflussmodell für die Linienplanung entwickelt, welches die Wege von Passagieren und Linien im Netz miteinander verknüpft [1]. Dieses Modell erlaubt im Gegensatz zu früheren Modellen eine Auswahl der Wege von Linien und Passagieren, d. h. die Wege sind nicht im Vorhinein fixiert. Die Lösung der LP-Relaxierung stellt sich als NP-schwer heraus. Bei der Lösung dieser Relaxierung durch Spaltengenerierung müssen für die Passagierwege kürzeste Wege gefunden und für die Linienwege ein längste-Wege-Problem gelöst werden, das NP-schwer ist.

Unsere Implementierung eines Spaltenerzeugungsverfahrens zur Lösung der LP-Relaxierung basiert auf einer exakten Suche nach Linienwegen mit einer beschränkten Länge. Für das Netz von Potsdam mit 450 Knoten und 2094 Kanten braucht unser Verfahren ungefähr eine halbe Stunde. Die Daten wurden uns von unseren Kooperationspartnern zur Verfügung gestellt, siehe Abbildung 2.48. Nach unserer Kenntnis stellt dies das größte bisher betrachtete Problem dar. Zur Zeit arbeiten wir an der Generierung von qualitativ guten ganzzahligen Lösungen für die Linienplanung. Diese Ergebnisse müssen nun mit unseren Kooperationspartnern diskutiert werden.

Ziel der *Preisplanung* ist der Entwurf eines Preissystems mit verschiedenen Fahrkartentypen, um die Einnahmen eines Verkehrsunternehmens zu maximieren. Dabei nehmen wir an, dass das Verhalten der Passagiere in Abhängigkeit von den Preisen durch eine Nachfragefunktion beschrieben wird.

Die Preise optimieren wir durch ein neues nichtlineares Modell. Als Nachfragefunktion untersuchten wir zunächst einfache Exponentialfunktionen bzw. quadratische Funktionen. Danach haben wir ein realistischeres Discrete-Choice-Modell entwickelt, welches Auswahlmöglichkeiten der Passagiere zwischen verschiedenen Alternativen in Abhängigkeit von der Fahrtenhäufigkeit vorsieht, z. B. den Kauf von Monats- oder Einzelfahrkarten, aber auch Fahrten mit dem Auto. Die Fahrtenhäufigkeit wird dabei als binomialverteilt angenommen.

Durch Anwendung von Standard-Software konnten wir die optimalen Preise für das Intercitynetz der Niederlande und das Netz von Potsdam berechnen. In Zukunft planen wir das Modell schrittweise durch Hinzunahme weiterer Parameter wie z. B. der Fahrzeit realistischer zu gestalten.

Trassenbörse im Bahnverkehr

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Sascha G. Lukac

Kooperationspartner: Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), TU Berlin; Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (WIP), TU Berlin; Ilgmann + Miethner Unternehmensberatung, Berlin

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Ein neuer Ansatz zur Verbesserung der Auslastung und der ökonomischen Effizienz von Eisenbahnnetzen besteht in der Auktionierung von Fahrtrassen. Bei dieser Methode reichen konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen in mehreren Auktionsrunden Gebote für frei gewähl-

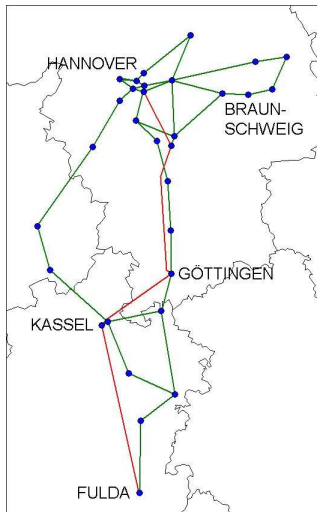


ABBILDUNG 2.49: Testnetz Trassenbörse.

te Fahrtrassen ein. Auftretende Konflikte werden gelöst, indem in jeder Runde die Trassen einer erlösmaximalen Kombination alloziert werden. Endgültig zugeteilt wird die Trassenallokation in der letzten Auktionsrunde, in der kein Teilnehmer mehr ein Gebot erhöht. Es lässt sich volkswirtschaftlich argumentieren, dass bei Zuteilung von knappen Netzressourcen an den Meistbietenden die Wohlfahrt maximiert wird.

Ein wichtiges Teilproblem in diesem Auktionsmechanismus ist das Problem der Bestimmung einer erlösmaximalen Kombination aus einer Menge von Trassengeboten in jeder Auktionsrunde, das sogenannte Trassenallokationsproblem. Dieses Problem lässt sich als ein Mehrgüterflussproblem mit zusätzlichen Packungsbedingungen in einem Ort-Zeit-Graphen auffassen. Wichtige Aspekte in diesem Modell sind Möglichkeiten zur kontrollierten Verschiebung von Trassen und die Abgabe von kombinatorischen ODER- und UND-Geboten, die z. B. zur Anschlussicherung verwendet werden können. Einige mathematische Eigenschaften des Modells werden in [7] untersucht.

Wir haben ein Optimierungssystem OPTRA zur optimalen Trassenallokation entwickelt, das aus einem Modellgenerator, einem auf CPLEX basierenden Löser und einer Visualisierungskomponente besteht. Derzeit können wir damit Szenarien mit bis zu 1.000 Trassengeboten über einen Zeithorizont von 6 Stunden auf einem vereinfachten Teilnetz der Deutschen Bahn lösen, das bei einer Gesamtleislänge von über 2.000 km von Hannover über Braunschweig bis nach Fulda reicht und 31 Bahnhöfe umfasst. Das Netz enthält auch bahntechnisch komplizierte Abschnitte, darunter die Hildesheimer Kurve, siehe Abbildung 2.49.

Unser langfristiges Projektziel besteht in der Verfeinerung unseres Modells und der Verbesserung der Leistungsfähigkeit unserer Verfahren. Wir erhoffen uns davon die Lösung größerer und realitätsnäherer Instanzen.

Vehicle Routing mit Heterogener Flotte

Bearbeitet von: Ralf Borndörfer, Andreas Westerlund

Kooperationspartner: DaimlerChrysler AG (Berlin); Universität Linköping (Schweden)

Förderung: Marie Curie Stipendium des Europäischen Graduiertenkollegs „Combinatorics, Geometry, and Computation“

Das Heterogeneous-Fleet-Vehicle-Routing-Problem (HFVRP) ist eine Verallgemeinerung des klassischen Vehicle-Routing-Problems (VRP) um eine Flottenplanung, bei der nicht nur die Fahrtrouten, sondern auch die zu verwendende Anzahl an Fahrzeugen verschiedener Typen zu bestimmen ist; die Fahrzeugtypen unterscheiden sich in Kapazität und Fixkosten.

Das Problem, das auch als Fleet-Size-and-Mix-Vehicle-Routing-Problem bekannt ist, tritt in der Flotten- und Einsatzplanung von Logistikunternehmen auf. Mit unserem Kooperationspartner DaimlerChrysler AG haben wir Instanzen einer Spedition mit bis zu 303 Kunden und sieben Fahrzeugtypen mit Kapazitäten zwischen 1030 und 13025 kg bearbeitet; zum Vergleich mit der Literatur haben wir zusätzlich künstlich erzeugte Datensätze aus einer bekannten VRP-Library untersucht.

Die Literatur zum HFVRP beschränkt sich, soweit uns bekannt ist, auf die Entwicklung und den Vergleich von Heuristiken. Ziel dieses Projektes war die Entwicklung starker IP-Formulierungen und, wenn möglich, von Verfahren zur beweisbar optimalen Lösung von HFVRPs.

Wir haben verschiedene neue kantenbasierte IP-Modelle des HFVRP entwickelt und analysiert, die den in der Literatur publizierten Big-M-Formulierungen überlegen sind; Kernpunkt ist die Einführung zusätzlicher Variablen und darauf basierender Ungleichungen, die wir in einem Branch-and-Cut-Ansatz mit entsprechenden Branching-Strategien gekoppelt haben. Alternativ haben wir einen Dekompositionsansatz verfolgt und dafür ein Spaltenerzeugungsverfahren entwickelt; die dabei auftretenden Pricing-Probleme haben wir mit einem auf Christofides zurückgehenden sogenannten „ q -path“-Ansatz gelöst.

Wir konnten für eine Reihe unserer künstlichen Testinstanzen beweisen, dass die beste bisher bekannte Lösung tatsächlich optimal ist, bzw. untere Schranken verbessern. Für die sehr viel größeren DaimlerChrysler-Probleme konnten wir in der kurzen Projektlaufzeit von 6 Monaten keine guten unteren Schranken berechnen; unsere Ergebnisse scheinen aber anzudeuten, dass die Heuristik von Richter [8], die uns ebenfalls von DaimlerChrysler zur Verfügung gestellt wurde, sehr gute Resultate erzielt.

Die Projektergebnisse werden in der Dissertation von Andreas Westerlund veröffentlicht.

Management verteilter Lager: Transportorganisation bei stochastischer Nachfrage

Bearbeitet von: Stefan Röhl

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung

Logistikdienstleister, die Lagerhäuser an mehreren Standorten betreiben, nutzen oft einen LKW-Shuttledienst zur Umschichtung der Produktmengen zwischen den Lagern entsprechend dem Bedarf und den jeweiligen Lagerkapazitäten. Dabei sind die Bedarfe z. T. sehr kurzfristig im Vorhinein bekannt, so dass die Zeit nicht in jedem Fall ausreicht, um Ware

aus anderen Lagerhäusern rechtzeitig heranzuschaffen. Bei Nachfragespitzen kann es darüber hinaus zu Engpässen bei den vorhandenen Transportkapazitäten kommen. 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. Dabei ist zu berücksichtigen, dass viele Artikel nur palettenweise in großen Stückzahlen transportiert werden können.

Konkret untersuchten wir in diesem Projekt, das von April 2001 bis März 2004 vom BMBF innerhalb des Förderprogramms *Neue mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistung* unterstützt wurde, das folgende Fallbeispiel. Unser Projektpartner, die eCom Logistik, betreibt Lagerhäuser an zwei verschiedenen Standorten in Berlin und Umgebung und bietet als Dienstleistungen die Lagerung, die Kommissionierung und den Versand von Waren an.

Aufgabe der eCom Logistik ist es, die Auslagerungsanfragen an jedem Ort zeitgerecht zu bedienen. Die Planung der Transporte erfolgte vor Projektbeginn von Hand, wobei die Verteilung der Artikel auf die Lager im Wesentlichen freigestellt war und auf eigene und angemietete Lastkraftwagen zurückgegriffen wurde.

Als mathematisches Modell dienten uns dabei durch lineare Nebenbedingungen gekoppelte Netzwerkflussprobleme, die den zeitdiskretisierten Fluss der LKW und Paletten der verschiedenen Artikel widerspiegeln. Es wird durch eine geeignete Wahl eines stückweise linearen Zielfunktional, das die Transportkosten und vorgegebene prognostizierte Sicherheitsniveaus für die einzelnen Artikel berücksichtigt, eine ausreichende Bevorratung der Artikel erzwungen. Dieses erlaubt eine genaue Modellierung der gewünschten Transportprioritäten. Für die Schätzung der Sicherheitsniveaus werden geeignet gewichtete empirische Verteilungen der Nachfrage der einzelnen Artikel an den Standorten für die letzten Wochen genutzt, da sich hierfür kein parametrisches Modell als geeignet erwies.

Um trotz der Größe des entstehenden ganzzahligen 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.

Die Monate Januar bis März 2004 wurden dazu genutzt, die Verbindung zwischen Online-Datenstrom und Optimierungssoftware herzustellen sowie erste Testläufe im realen Online-Szenario durchzuführen. Bei der eCom Logistik wurde derweilen eine eigene Datenbankschnittstelle für das neue Datenmodell errichtet. Diese neue Informationsquelle wird inzwischen bei der eCom Logistik mit großem Gewinn eingesetzt und bereits als wesentlicher Zugewinn aus der Kooperation betrachtet.

Mit dem Auslaufen der Finanzierung durch das BMBF Ende März 2004 und dem Wechsel von Herrn Röhl an die Fachhochschule Vorarlberg wurde das Projekt dort und an der Technischen Universität Chemnitz von Herrn Helmberg und einer studentischen Hilfskraft, Herrn Fischer, bis zum Ende des Berichtsjahres zum Abschluss gebracht.

In diesen letzten Monaten konnten wesentliche weitere Fortschritte erzielt werden. Mit Hilfe von Herrn Fischer gelang die Anbindung der Optimierungssoftware an die Datenbankschnittstelle bei der eCom Logistik, dort steht nun das Optimierungspaket seit Juni zur Verfügung und speist Transportvorschläge direkt in die Datenbank ein. Seit Mitte September 2004 exi-

stiert ein von der eCom Logistik erstelltes Webinterface zu diesen Daten, das vom Dispatcher vor Ort genutzt werden kann.

An der TU Chemnitz steht nun ein vollständiger Online-Datenstrom realer Daten von über einem halben Jahr für Testzwecke zur Verfügung. Diese wurden inzwischen, entsprechend verfremdet, für die Allgemeinheit nutzbar gemacht. Anhand dieser Daten wurde das Kostenmodell des Optimierungsproblems weiter verfeinert und evaluiert.

Pro Lauf entstehen dabei ganzzahlige Programme mit etwa einer Million Variablen und einigen hunderttausend Nebenbedingungen. Im Durchschnitt benötigt unser Verfahren etwa 10 Minuten für die Ermittlung eines Vorschlags. Die Vorschläge liegen bezüglich der entwickelten Zielfunktion für den derzeit realen Fall von zwei Standorten im Durchschnitt innerhalb von 2,7% des Optimums, für die auf drei Standorte verteilten Daten innerhalb von 17% des Optimums. Kommerzielle Löser für lineare Programme benötigen im Vergleich bereits durchschnittlich über eine Stunde, um nur die Anfangsrelaxierung zu lösen.

Das Projektziel, ein für die Aufgabenstellung taugliches algorithmisches Lösungsverfahren zu entwickeln, konnte also voll erreicht werden. Die endgültige Erprobung in der Praxis steht auf Grund der wirtschaftlich bedingten Zeitverzögerungen noch aus, jedoch ist das Optimierungspaket bereits beim Industriepartner installiert, voll lauffähig und die erzeugten Vorschläge sind über ein in Kooperation mit dem Industriepartner gestaltetes Interface vor Ort allgemein zugänglich.

Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *Models for Line Planning in Public Transport*. Report 04–10, ZIB, 2004.
- [2] R. Borndörfer und A. Löbel, *Scheduling Duties by Adaptive Column Generation*, Report 01–02, ZIB, 2001.
- [3] 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.
- [4] R. Borndörfer, A. Löbel und S. Weider, *A Bundle Method for Integrated Multi-Depot Vehicle and Duty Scheduling in Public Transit*, Report 04–14, ZIB, 2004.
- [5] C. Helmberg und S. Röhl, *A Case Study of Joint Online Truck Scheduling and Inventory Management for Multiple Warehouses*, Report 05–11, ZIB, 2005.
- [6] M. Kolonko und W. Fengler, *Entwicklung von Fahrplänen unter mehrfacher Zielsetzung*, *Der Nahverkehr* **11** (1997), 45–48.
- [7] S. Lukac, *Holes, Antiholes and Maximal Cliques in a Railway Model for a Single Track*, Report 04–18, ZIB, 2004.
- [8] G. Richter, *Fuhrparkstrukturen in Ballungsgebieten – Erprobung eines Verfahrens zur Bestimmung optimaler Fuhrparkzusammensetzungen*, Diplomarbeit, TU Berlin, 1992.

2.2.13 Verteilte Systeme und Anwendungen

Am ZIB werden seit mehreren Jahren Algorithmen und Methoden für das Management und die Nutzung verteilter, dynamischer Systeme entwickelt. Ausgehend von den vorhandenen Grid-Systemen, die zumeist auf der Grundlage traditioneller Client/Server-Architekturen entwickelt wurden, beschäftigen wir uns mit dem Einsatz neuer Peer-to-Peer-Techniken in Grid-Systemen [4, 8]. Sie bieten den Vorteil einer potentiell unbegrenzten Skalierbarkeit, d.h. es können beliebig viele Nutzer gleichzeitig bedient werden. Da jeder neu hinzukommende Knoten auch zugleich Dienstleistungen erbringt, haben Peer-to-Peer-Systeme eine bessere Ausfallsicherheit als traditionelle Grid-Systeme, was für den Einsatz in dynamischen Systemen besonders bedeutsam ist. Auch die selbständige Systemkonfiguration (z.B. bei Komponentenausfällen) wird durch die Nutzung von Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

In den EU-Projekten GridLab, DataGrid und FlowGrid des 5. Rahmenprogramms haben wir traditionelle Grid-Techniken weiterentwickelt und eingesetzt. Im gerade begonnenen 6. Rahmenprogramm der EU arbeiten wir nun im EU-Projekt CoreGrid an neuartigen, auf den oben genannten Peer-to-Peer-Methoden aufsetzenden Systemarchitekturen. In einem weiteren, gleichfalls im Jahr 2004 angelaufenen EU-Projekt, GridCoord, sind wir auf politischer Ebene an der Abstimmung und Neuschaffung nationaler Förderstrategien für das Grid Computing beteiligt.

Im Zentrum unserer Forschungsarbeiten steht das Management sehr großer verteilter Datenmengen. Unter der Bezeichnung *ZIB-DMS* entwickeln wir skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung attributierter Dateien in verteilten Systemen. Da die Speicherknoten im Grid jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine geeignete Datenreplikation unabdingbare Voraussetzung [7]. Wir entwickeln Methoden für Datenplatzierung, Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Zum praktischen Test unserer Datenmanagement-Verfahren dienen Anwendungen aus der Bioinformatik. In der Nachwuchsforschergruppe "Alignment und Threading auf parallelen Systemen" des Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik (BCB) werden Algorithmen zur Strukturvorhersage von Proteinen entwickelt. Diese sind für den Einsatz in dynamischen, verteilten Systemen konzipiert und greifen auf sehr umfangreiche, gleichfalls verteilte Daten zu.

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

Bearbeitet von: Thorsten Schütt, Minor Gordon, Andrei Hutanu, Felix Hupfeld, Thilo Koch, André Merzky, Tinosch Kolagheichi-Ganjineh, Alexander Reinefeld, Simon Rieche, Florian Schintke, Brygg Ullmer, Stefan Zwierlein

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), ISI (USA), University of Wisconsin (USA), SUN, COMPAQ

Förderung: Europäische Union, 5. Rahmenprogramm

Um Anwendungsprogrammierern den Einstieg in das Grid Computing zu erleichtern, werden Werkzeuge benötigt, die sie bei der Anpassung ihrer Anwendung an eine Grid-Umgebung unterstützen. Zu diesem Zweck wird in dem EU-Projekt GridLab (www.gridlab.org) eine anwendungszentrierte Programmierbibliothek inklusive der Dienste entwickelt, die für den Aufbau eines Grids benötigt werden.

Die Bibliothek, genannt GAT (Grid Application Toolkit), stellt Abstraktionen zur Verfügung, die zur Entwicklung und zum Anpassen von Grid-Anwendungen häufig benötigt werden. Dazu gehören: entfernter Zugriff auf und Management von Dateien, Kommunikation mit Verzeichnisdiensten, das Überwachen von Programmen und Ressourcen, und das entfernte Starten von Programmen. Diese Abstraktionen sind für die Bedürfnisse der Anwendungen ausgelegt und nicht von den Möglichkeiten einzelner Grid-Umgebungen abhängig. Da die Anpassung an verschiedenste Grid-Umgebungen über mitgelieferte Adapter im GAT selbst erfolgt, können GAT-basierte Anwendungen ohne weitere Anpassungen auf einer Vielzahl von Grids ausgeführt werden.

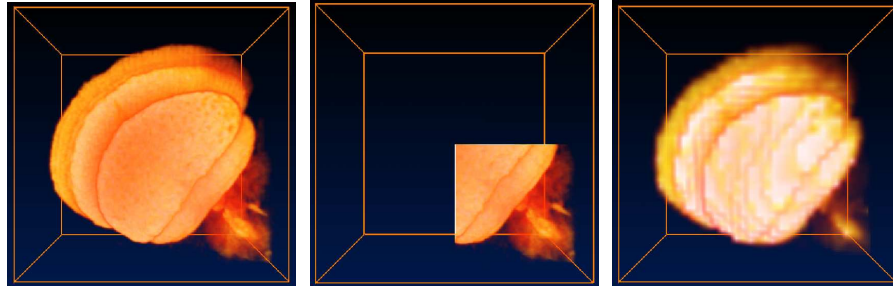


ABBILDUNG 2.50: Effiziente Visualisierung durch selektive Übertragung benötigter Daten

Neben dem GAT werden im GridLab-Projekt Dienste für den Aufbau eines vollwertigen Grids entwickelt. In dem vom ZIB geleiteten Arbeitspaket „Data Handling and Visualization“ sind das neben Diensten zum Ordnen, Verwalten und Übertragen von Dateien ein webbasierter Visualisierungsdienst, mit dem Zwischenergebnisse entfernt laufender Jobs graphisch dargestellt werden können (vgl. Abbildung 2.50). Da die in wissenschaftlichen Anwendungen erzeugten Daten oft sehr umfangreich sind, werden nur diejenigen Daten übertragen, die für die Darstellung der gewählten Sicht benötigt werden. Hierzu wurde eine Beschreibungssprache entwickelt, die es für beliebige Dateiformate erlaubt, die notwendigen Teilmengen der Daten zu spezifizieren [9].

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, 5. Rahmenprogramm

Im DataGrid-Projekt (www.eu-datagrid.org) wurde eine Software für die Verwaltung einer global verteilten Rechnerinfrastruktur entwickelt. Diese Rechnerinfrastruktur wird für die Auswertung der Daten (jährlich mehrere Petabyte; $1\text{PB} = 10^{15}$ Byte), die durch die nächste

Generation von Kernteilchen-Experimenten auf dem Large Hadron Collider (LHC) erzeugt werden, benötigt. 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 2006/07 weltweit insgesamt ca. 50.000 PCs für die Datenanalyse zur Verfügung stehen. Alle Regionalzentren sind über die Grid-Software miteinander verbunden, so dass die Jobs der Physiker an beliebigen Orten gerechnet werden können.

Im DataGrid-Projekt haben wir Software für die Integration lokaler Cluster in das Grid entwickelt. Der „Abstraction Layer“, eine neu entwickelte Softwareschicht, ermöglicht die Integration verschiedener Ressourcen-Managementsysteme und stellt eine einheitliche Schnittstelle für die Planung und Ausführung administrativer Aufgaben zur Verfügung. Die „Information Provider“ stellen Informationen über die verteilte Rechnerinfrastruktur bereit. Durch die Verwendung des sog. GLUE-Schemas soll die Benutzung weltweiter Ressourcen vereinfacht werden.

Im Berichtszeitraum haben wir abschließende Arbeiten durchgeführt und eine Publikation unserer Ergebnisse des Arbeitspakets „Fabric Management“ vorbereitet, die im Journal of Grid Computing erscheinen wird. Die von uns entwickelten Information Provider werden auch in anderen Projekten eingesetzt, z.B. EU FlowGrid und EU EGEE. Darüber hinaus werden die für den Abstraction Layer entworfenen Methoden für die Erweiterung der Fähigkeiten von Ressourcen-Management-Systemen im Projekt „Co-Reservierung von Ressourcen im Grid“ verwendet.

FlowGrid - Flow Simulations On-Demand Using Grid Computing

Bearbeitet von: Jan Wendler, Artur Andrzejak, Guillermo Arias del Rio, Alexander Reinfeld, Florian Schintke

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

Förderung: Europäische Union, 5. Rahmenprogramm

Im Projekt FlowGrid (www.unizar.es/flowgrid) wird eine virtuelle Organisation für die Durchführung von Strömungssimulationsrechnungen aufgebaut, um die gemeinsame Nutzung von Software, Computerressourcen und Wissen zu ermöglichen. Dazu wird mit Hilfe der Grid-Infrastruktur ein Netzwerk von Rechenkapazitätsanbietern, Programmeigentümern und Nutzern eingerichtet. Die Vorbereitung, Ausführung und Überwachung der Simulationen sind sowohl räumlich als auch organisatorisch verteilt. Das FlowGrid-System wird für die Durchführung anspruchsvoller Simulationen in den Bereichen Schiffbau, Autoabgase und Verbrennung fossiler Brennstoffe durch die Projektpartner eingesetzt.

Innerhalb des Projektes sind wir für die Entwicklung und Bereitstellung der „FlowServe“-Middleware verantwortlich [11]. Im Berichtszeitraum wurde der Prototyp weiterentwickelt und an die Nutzeroberfläche APUS-CFD-Client, neuere Grid-Middleware und weitere Anforderungen der Nutzer angepasst. Die graphische Benutzerschnittstelle übergibt FlowServe den Auftrag zur Durchführung einer Simulation im Grid. FlowServe verteilt die Simulation auf geeignete Cluster mittels Globus, überwacht deren Ausführung und generiert Status- und Fortschrittsberichte.

Unser Hauptanliegen in diesem Projekt ist die Erforschung und Entwicklung von Grid-Umgebungen, die einen benutzerfreundlichen und effizienten Zugriff auf geographisch verteilte

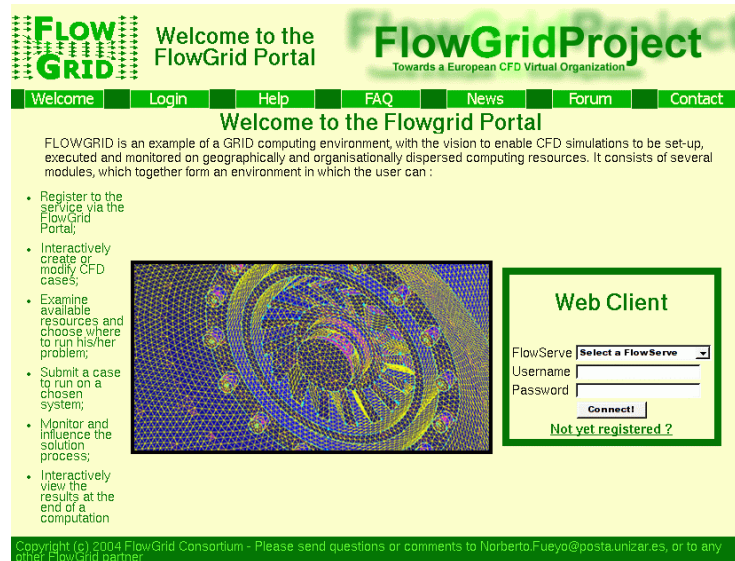


ABBILDUNG 2.51: FlowGrid-Portal

Ressourcen ermöglichen. Hierfür wurde als zusätzliche, einfache Schnittstelle ein Web-Portal geschaffen (siehe Abbildung 2.51), über das das Arbeiten mit dem System ohne Softwareinstallation auf dem Rechner der Nutzer möglich ist. Im FlowGrid Projekt wurde Grid-Computing für den Einsatz in einem industriellen Produktionsumfeld vorbereitet, in dem die Nutzer keine Gridexperten sind und auch ohne Detailwissen über Grid-Computing dank dieser neuen Technologie effizienter arbeiten können.

GridCoord

Bearbeitet von: Alexander Reinefeld, Florian Schintke

Kooperationspartner: DIST (Italien), UP (Italien), HLRS (Deutschland), QUB (Irland), EPSRC (United Kingdom), INRIA (Frankreich), UNSA (Frankreich), UvA (Niederlande), MTA SZTAKI (Ungarn), UPM (Spanien), VINNOVA (Schweden), PSNC (Polen)

Förderung: Europäische Union, 6. Rahmenprogramm

Das Thema Grid-Computing erfährt auf nationaler und internationaler Ebene zur Zeit starken Aufwind, was sich unter anderem durch bereits aktive oder geplante Grid-Forschungsförderprogramme auf nationaler und europäischer Ebene bemerkbar macht. Neue Technologien und Methoden müssen entwickelt und existierende Verfahren erweitert werden, um weiteren wissenschaftlichen Disziplinen und Anwendungen den Nutzen des verteilten Arbeitens und Rechnens zu eröffnen [5].

Eine bessere Koordination zwischen den einzelnen Fördereinrichtungen wird für diesen Themenkomplex immer dringlicher, um das benötigte Fördervolumen für innovative und auf internationaler Ebene konkurrenzfähige Forschung bereitzustellen und dabei gleichzeitig sowohl eine Doppelförderung als auch eine hinderliche Fragmentierung der zur Verfügung stehenden Mittel von vornherein auszuschließen. GridCoord stellt hierfür wichtige Informationen über die Grid-Forschung der einzelnen europäischen Länder zusammen und entwickelt Strategien, für künftige Grid-Forschungsförderung, die in einem Entwurf für ein innovatives, abgestimmtes europäisches Forschungsförderungsprogramm münden.

CoreGrid

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Felix Hupfeld, Alexander Reinefeld, Thomas Röblitz, Thomas Steinke, Florian Schintke, Thorsten Schütt

Förderung: Europäische Union, 6. Rahmenprogramm

Das Projekt CoreGrid hat die Förderung der Zusammenarbeit von Europäischen Forschungsinstituten und Universitäten im Bereich der Grid-Infrastruktur zum Ziel. Als sogenanntes *Network of Excellence* soll es zugleich die Qualität der Forschung in diesem Bereich steigern und die Forschungsergebnisse einer breiteren Öffentlichkeit vorstellen. Dieses Ziel soll durch eine Reihe von gemeinsamen Forschungsaktivitäten, Symposien, gegenseitigen Kurzbesuchen und Stipendien erreicht werden. Weitere Kooperationspunkte ergeben sich über die aktuelle oder erwartete Mitgliedschaft der teilnehmenden Partner in fünfzehn nationalen Grid-Programmen, die in der folgenden Abbildung 2.52 dargestellt sind.

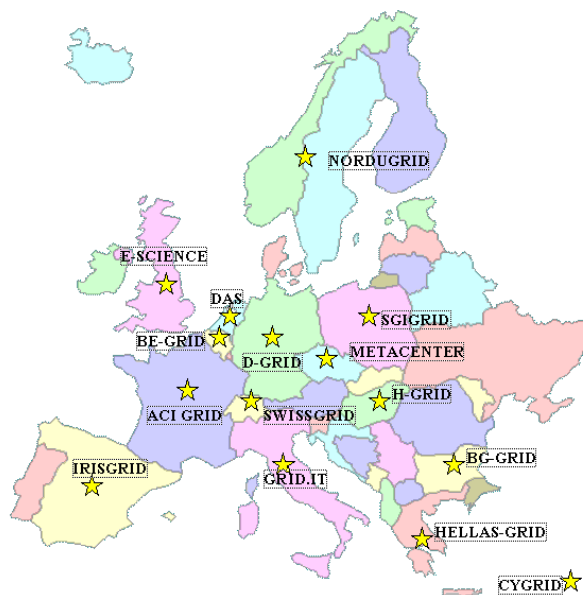


ABBILDUNG 2.52: CoreGrid Partner und nationale Grid-Programme

Die wissenschaftliche Zusammenarbeit der 42 CoreGrid Partner wird in sechs *virtuellen Instituten* organisiert, die je einen Aspekt der Grid-Forschung abdecken:

- WP2: Knowledge & Data Management
- WP3: Programming Model
- WP4: System Architecture
- WP5: Grid Information and Monitoring Services
- WP6: Resource Management and Scheduling
- WP7: Problem Solving Environments, Tools and Grid Systems.

Das ZIB ist an den virtuellen Instituten WP4 und WP6 beteiligt, wobei das Hauptgewicht auf WP4 (System Architecture) liegt, das von A. Andrzejak geleitet wird. Dieses Arbeitspaket

umfasst zur Zeit 16 Partner (CETIC, CNRS, FORTH, INRIA, KTH, MU, SICS, SZTAKI, UNICAL, UCAM, UCO, UCY, UCL, UoW, VTT, ZIB). Die wissenschaftlichen Hauptthemen dieses virtuellen Institutes liegen in der Untersuchung von Skalierbarkeit, Adaptivität, und Fehlertoleranz der Grid Architekturen. Die Aufgaben des WP4 sind in sechs *tasks* unterteilt, von denen zwei vom ZIB geleitet werden.

Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern

Bearbeitet von: Thomas Steinke, René Heek, Bernd Kallies, Patrick May, Alexander Reinefeld

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

Förderung: BMBF, im Rahmen der BCB Forscher-Nachwuchsgruppe

Die Forschungsaufgaben der Nachwuchsgruppe „Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern“ des „Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik“ (BCB) umfassen die beiden Schwerpunkte Strukturvorhersage mit Hilfe der Threading-Methode sowie die Realisierung eines Applikationsportals für ausgewählte Bioinformatikanwendungen im BCB-Verbund.

Ausgehend von den verschiedenen weltweiten Genomsequenzierungs-Projekten steht den Wissenschaftlern im Bereich Life Science eine sehr große Anzahl von Proteinsequenzdaten zur Verfügung. Zum detaillierten Verständnis der Funktion eines Proteins in seiner zellulären Umgebung ist die Kenntnis der dreidimensionalen Struktur des Proteins nötig. Die Hauptaufgabe unserer Gruppe besteht in der Entwicklung und Implementation eines Frameworks zur Proteinstruktur-Vorhersage. Die Threading-Methode sucht auf der Basis experimenteller Daten aus einer gegebenen Menge von Proteinstrukturen für eine Sequenz mit unbekannter Struktur diejenige aus, die der nativen Struktur am ähnlichsten ist. Die Strukturvorhersage wird in einer automatischen Pipeline bewerkstelligt. Die Pipeline umfasst in der Phase der Vorprozessierung die Analyse der Sequenz, dem folgt das eigentliche Threading, und schließlich die 3D-Modellierung (Abbildung 2.53).

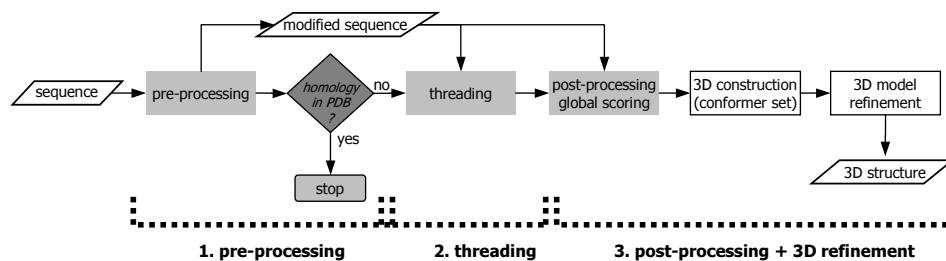


ABBILDUNG 2.53: Pipeline zur Proteinstruktur-Vorhersage am ZIB

Im Berichtszeitraum haben wir die Scoring-Funktion zur Bewertung der Ähnlichkeit einer Sequenz mit einem Struktur-Template um Terme für die Güte des Sekundärstrukturalignments sowie um ein Profile-Profile-Alignment zwischen den Sequenzen des unbekanntes Proteins und der bekannten Struktur erweitert [2].

Im Sommer 2004 haben wir mit der Arbeitsgruppe Preissner (Charite/HUB) als BCB-Team am weltweiten CASP6-Wettbewerb (Critical Assessment of Techniques for Structure Prediction), zusammen mit insgesamt ca. 260 anderen Expertengruppen und automatischen Servern, teilgenommen. Unsere erzielten CASP-Ergebnisse zeigen die Stärken der Threading-Methode, aber auch noch einige Schwächen unserer momentan verwendeten Scoring-Funktion. In den Kategorien „Analog Fold Recognition“ und „New Folds“ funktionierte unsere Threading-Umgebung sehr gut und erreichte einige Top20-Plazierungen. Dagegen war das Abschneiden in der Kategorie „Homologous Fold Recognition“ weniger zufriedenstellend, was an der Parametrisierung auf einem nicht-homologen Testdatensatz lag.

Als Teil des Preprocessing-Schrittes innerhalb unserer Pipeline wurden die Sequenzanalyse-Tools PSI-BLAST und CLUSTALW als Webservices implementiert und sind nun als Komponenten in einem BPEL-basierten Workflow verfügbar. Der Workflow ist über ein Webportal zugänglich und wurde zur Entscheidungsfindung des Target-Typs (Homologie-Modellierung vs. Faltungserkennung) im CASP6-Wettbewerb erfolgreich eingesetzt.

Auf dem Gebiet der graphentheoretischen Repräsentation von Protein-Topologien (PTGL) arbeiten wir mit der Gruppe von I. Koch (TFH Berlin) zusammen [1]. In Zusammenarbeit mit der Gruppe Knapp (FUB) wurden für die Verbesserung des paarweisen Kontaktpotentials verschiedene Algorithmen zum Alignment von Sekundärstrukturelementen implementiert. Als Teil des COLUMBA-Konsortiums, bestehend aus Charite, Informatik/HUB und ZIB wird die COLUMBA-Datenbank auf dem Frontend-Rechner unseres Cluster-Systems betrieben.

Peer-to-Peer Techniken für verteiltes Datenmanagement

Bearbeitet von: Florian Schintke, Thorsten Schütt, Tinosch Kolagheichi-Ganjineh, Monika Moser, Christian von Prollius, Alexander Reinefeld, Roland Tuschl, Jochen Witte

Mit dem zunehmenden Einsatz von Grid-Systemen im produktiven Betrieb rücken zwei Aspekte solcher Systeme immer mehr in den Vordergrund: die Skalierbarkeit und die Zuverlässigkeit. Um beides zu erhöhen, werden zentrale, leistungs- und ausfallkritische Komponenten, wie beispielsweise der Monitoring & Discovery Service (MDS) in Globus, durch hierarchisch vernetzte Implementationen ersetzt.

In letzter Zeit hat sich die Forschung im Bereich Peer-to-Peer Computing (P2P) besonders mit Skalierbarkeit und Zuverlässigkeit beschäftigt. Die bekanntesten Verfahren aus diesem Bereich sind Lookup-Dienste und verteilte Hashtabellen. Diese flachen, nicht-hierarchischen P2P-Systeme bieten sowohl eine gute Skalierbarkeit als auch eine verbesserte Ausfallsicherheit durch Redundanz. Jeder Peer führt denselben verteilten Algorithmus aus und handelt nach denselben Regeln. Dadurch ist jeder Peer gleich wichtig bzw. unwichtig. Den Dienst erbringen alle Peers gemeinsam.

Die bekannten P2P-Systeme sind größtenteils monolithisch aufgebaut, was die Substitution einzelner Komponenten sowie deren Wiederverwendung in anderen Systemen erschwert. Grid-Systeme sind aber in der Regel sehr komplex und werden durch das Zusammenspiel vieler kleiner Dienste realisiert. Wenn jeder Dienst durch ein einzelnes, speziell dafür ausgelegtes P2P-System erbracht wird, erhält man ein Komponentenmodell, in dem jede (verteilte) Komponente einem P2P-Dienst entspricht. Ähnlich dem erfolgreichen UNIX-Toolset-Ansatz wird dadurch die Komplexität der einzelnen Dienste reduziert, was eine erhöhte Robustheit zur Folge hat. Weitere Informationen sind in unserem Artikel der „Annual Reviews of Scalable Computing“ vorgestellt worden [7].

Ob dieser Ansatz auch in der Praxis so anwendbar ist, überprüfen wir mit unserem Prototypen ZIB-DMS, ein verteiltes System zur Verwaltung replizierter Daten im Grid. Zusätzlich werden mit diesem Prototyp auch die effiziente verteilte MetadatenSpeicherung, neue Mechanismen für den Umgang mit sehr großen Dateimengen, effiziente Zugriffsmechanismen für verteilte Daten, topologieberücksichtigende Synchronisationsverfahren und Möglichkeiten zur Selbstoptimierung und Adaption an sich verändernde Umgebungen untersucht. Als ein Beispiel für die Adaption und Selbstoptimierung steuert das System selbständig die Anzahl der Replikate einer Datei, um eine gegebene Sollverfügbarkeit zu gewährleisten.

Ein erster Prototyp, der durch die Nutzung von Standardschnittstellen einfach in existierende Systeme integrierbar ist, ist fertiggestellt und wird kontinuierlich um weitere Funktionalitäten ergänzt. Erste Forschungsergebnisse, die im Rahmen dieses Projektes entstanden sind, konnten auf Konferenzen und in wissenschaftlichen Journalen veröffentlicht werden; das funktionierende Softwaresystem wurde erstmals im Mai 2004 vorgestellt.

StorageBox - Das mobile persönliche Datenbanksystem

Bearbeitet von: Felix Hupfeld, Minor Gordon, Thilo Koch

Als persönliches Datenbanksystem ist StorageBox (www.storagebox.org) darauf ausgelegt, alle beim alltäglichen persönlichen Gebrauch des Computers anfallenden Daten strukturiert zu speichern, und für den Benutzer und andere Programme komfortabel zugreif- und verwaltbar zu machen.

Um den Benutzer bei der Verwaltung seiner Daten auf mehreren Geräten zu entlasten, sorgt StorageBox selbständig für Verteilung und Abgleich der Daten. Damit kein Gerät als zentrale Datenbank dienen muss, kann der Abgleich von geänderten Daten dabei auch über Dritte geschehen. Der Benutzer kümmert sich nur noch um eventuelle Konflikte, die bei gleichzeitiger Änderung von Daten auf verschiedenen Geräten auftreten können.

Um diesen Abgleich möglichst effizient zu gestalten, und somit auch auf kleinen Geräten einsetzbar zu sein, zeichnet das Datenbanksystem Historien der Änderungen und Abgleichvorgänge auf, und nutzt diese um mögliche Konflikte zu erkennen, veraltete Änderungen zu verwerfen und dabei alle Geräte auf dem neuesten Stand zu halten. Die Benutzung von Änderungshistorien hat gegenüber anderen Ansätzen den Vorteil, dass der Speicher- und Kommunikationsbedarf kleiner gehalten werden kann. Um noch mehr Effizienz zu erreichen, benutzt das Datenbanksystem von StorageBox die Änderungshistorien selbst als den eigentlichen Datenspeicher. Dabei ist es wichtig, dass solche aufgezeichneten Änderungen erkannt werden, die zwar nicht mehr an andere gemeldet werden müssen, und somit gelöscht werden könnten, die aber noch zum aktuellen Stand der Daten beitragen und somit Teil des Datenspeichers sind [10].

Zoetrop – Ereignisbasiertes Framework für Internet-Server

Bearbeitet von: Felix Hupfeld, Minor Gordon

Server-Software muss so strukturiert sein, dass sie eine hohe Rate von Anfragen parallel verarbeiten kann. Da die Computerhardware nur eine physische Ausführungseinheit (Prozessor) besitzt, wird diese vom Betriebssystem in virtuelle Ausführungseinheiten, sogenannte Threads, unterteilt, die in kurzer Abfolge durchgeschaltet werden.

Neben dem klassischen Ansatz, bei dem pro ankommender Anfrage ein solcher Thread auf Daten vom Netzwerk wartet und alle nötigen Schritte zur Bearbeitung einer Anfrage abarbeitet, kann Server-Software um die ankommenden Daten herum strukturiert werden. Dazu werden die nötigen Verarbeitungsschritte in einzelne Stufen zerlegt, die wie auf einem Förderband angekommene Ereignisse verarbeiten und daraus resultierende Ereignisse an die Warteschlange der jeweils nächsten Stufe weiterleiten. In Systemen mit mehreren Prozessoren legt man pro Prozessor eine solche Pipeline an, um den Kommunikationsbedarf zwischen den Prozessoren klein zu halten.

Zoetrop (www.storagebox.org) ist ein Framework für die Entwicklung von Server-Software, das nach dem ereignisbasierten Ansatz strukturiert ist. Es stellt grundlegende Abstraktionen für Stufen und den Aufbau von Pipelines auch auf Mehrprozessorsystemen bereit, so dass der Entwickler sich nicht mehr um systemnahe Aspekte kümmern muss. Darüber hinaus enthält es fertige Verarbeitungsstufen für Netzwerkkommunikation und Protokolldekodierung (HTTP, SOAP, WebDAV). Die Stufe für Netzwerkkommunikation benutzt auf jeder unterstützten Plattform (Windows, Linux, Mac OS X) eine möglichst effiziente Art, auf das Netzwerk zuzugreifen.

Die Verarbeitung von SOAP-Nachrichten erfolgt in Stufen, die automatisch aus einer Schnittstellenbeschreibung (IDL) erzeugt werden. Diese Schnittstellenbeschreibung dient ferner als Grundlage für die automatische Erzeugung von Ereignisvorlagen und externen Schnittstellenbeschreibungen in WSDL.

Co-Reservierung von Ressourcen im Grid

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

Förderung: IBM Deutschland Entwicklungs GmbH, Böblingen

Mit der zunehmenden Nutzung von Grid-Technologie bei der Lösung wissenschaftlicher Probleme und dem Bestreben der Industrie, Rechenleistung flexibel anbieten zu können, müssen komplexere Anforderungen an die Verwaltung der Ressourcen berücksichtigt werden. Dabei ist die Fähigkeit, einmal getroffene Qualitätsvereinbarungen einzuhalten, ein ganz zentraler Aspekt. Reservierungen von Ressourcen sind eine Möglichkeit, solche Vereinbarungen zu gewährleisten.

Existierende Ressourcen-Management-Systeme erlauben nur starre Reservierungsanfragen, d.h. die Parameter (Anzahl der CPUs, Startzeit und Endzeit) sind nicht aushandelbar. Die Auswahl erfolgversprechender Reservierungsparameter ist insbesondere in Grid-Umgebungen, in denen Zustandsinformationen über die Ressourcen unvollständig (Datenschutzbeschränkungen) oder veraltet sind, schwierig. Im Berichtszeitraum haben wir effiziente Algorithmen für die Bearbeitung flexibler Reservierungsanfragen in einfachen Szenarien – Beschränkung auf CPU-Ressourcen sowie gleichzeitige Reservierung mehrerer Ressourcen – entwickelt [3]. Diese Algorithmen sollen im nächsten Schritt erweitert werden, um unterschiedliche Ressourcen, die zu verschiedenen oder gleichen Zeiträumen benötigt werden, in Form einer einzigen Reservierung behandeln zu können.

Adaptive Workflows für automatisches Management von Computersystemen

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Ulf Hermann

Kooperationspartner: Hewlett-Packard Labs, Palo Alto, Kalifornien, USA

Die Automatisierung des Managements verteilter Computersysteme oder ganzer Rechenzentren ist in den letzten Jahren zu einem neuen Forschungsschwerpunkt der Informatik avanciert. Die Gründe dafür liegen in der wachsenden Komplexität und Anzahl der Systemkomponenten, die das manuelle Eingreifen zum Flaschenhals des Managements machen, sowie im zunehmenden Anteil der Managementkosten am „Total Cost of Ownership“. Untersuchungen haben ergeben, dass weit über 50% der Fehler in der Konfiguration von Ressourcen aufgrund menschlicher Irrtümer entstehen. Große Unternehmen wie IBM, HP oder Microsoft engagieren sich deshalb in diesem Forschungsbereich.

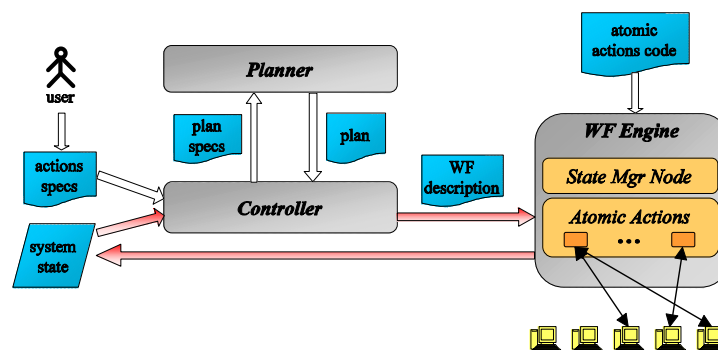


ABBILDUNG 2.54: Architektur des Systems FeedbackFlow

In diesem Projekt fokussieren wir uns auf die automatische Generierung von Workflows zum Zwecke der adaptiven Systemverwaltung. Im ersten Schritt werden Aktionen spezifiziert, die fundamentale Managementaktionen innerhalb eines verteilten Systems darstellen. Beispiele sind die Installation von Software, Transfer von Daten, Änderung der Konfigurationswerte. Durch die deklarative Spezifikationsart können diese Aktionen unter Verwendung des Systemzustands automatisch zu einem Workflow zusammengesetzt werden, um einen vorgegebenen Zielzustand des Systems zu erreichen. Ein Ziel könnte beispielsweise darin liegen, die vorhandenen Ressourcen zu einer virtuellen Serverfarm zusammenzuschließen, wobei die benötigte Software in einem Zwischenschritt konfiguriert wird. Anschließend wird der dort entstehende Workflow ausgeführt und die Rückmeldungen über Erfolg oder Misslingen der einzelnen Zwischenschritte eingesammelt, um die Beschreibung des neuen Systemzustands zu erzeugen. Anhand dieses Zustands kann dann automatisch entschieden werden, ob das Ziel erreicht wurde, oder eine erneute Iteration notwendig ist.

Dieser Ansatz wurde in dem prototypischen System „FeedbackFlow“ (Abbildung 2.54) umgesetzt. Die Hauptkomponente ist ein neu entwickelter Controller, der die Durchführung der beschriebenen Schritte koordiniert. Wir verwenden als Planer ein externes Programm MBP (entwickelt durch IRST Italien) und lassen den erzeugten Workflow von dem Triana-Framework ausführen. Dieser Prototyp ist für kleinere Managementbeispiele bereits einsetzbar, eignet sich aufgrund der mangelnden Effizienz des externen Planers jedoch nicht für größere Szenarios.

Die künftige Forschungsarbeit in diesem Bereich wird die Entwicklung eines spezialisierten und effizienten Planers umfassen, sowie die halbautomatische Extraktion der Regeln aus Logs von Managementvorgängen.

Modellierung und Vorhersage des Bedarfs von Anwendungen in verteilten Umgebungen

Bearbeitet von: Artur Andrzejak, Mehmet Ceyran, Alexander Reinefeld

Kooperationspartner: Hewlett-Packard Labs, Palo Alto, Kalifornien, USA

Die Modellierung und Vorhersage des Bedarfs von Anwendungen (sowie komplementär, der Kapazität von Ressourcen) ist in zwei Bereichen hilfreich. Zum einen erhöht sie die Effizienz bei der gemeinsamen Nutzung von Ressourcen, zum zweiten wird sie bei dem automatischen Management von Ressourcen eingesetzt.

Die gemeinsame Nutzung von Ressourcen ist wirtschaftlich motiviert. Die Erfahrung zeigt, dass die Ressourcen in industriellen wie auch wissenschaftlichen Rechenzentren nicht immer vollständig genutzt werden. Bei hochverfügbaren Anwendungen, die immer laufen müssen, wie auch bei periodisch wiederkehrenden Rechenjobs ergeben sich große Ersparnispotentiale durch die Reduzierung der Anzahl eingesetzter Server. Dieser als Serverkonsolidierung bezeichnete Vorgang ist besonders interessant im Bereich des Utility Computing, der im Rahmen der Zusammenarbeit mit Hewlett-Packard Labs angegangen wird.

Das automatische Management von Ressourcen ist ein Gebiet, das in den letzten Jahren große Aufmerksamkeit bekommen hat, und in einer Reihe von Initiativen wie z.B. Autonomic Computing von IBM verfolgt wird. Die Modellierung des Bedarfs wird dabei für die Erkennung von Anomalien (anomaly detection) und das Tuning der Performance verwendet. Im einfachsten Szenario kann der Vergleich des vorhergesagten und tatsächlichen Bedarfs über Anomalien oder Performanceprobleme Auskunft geben.

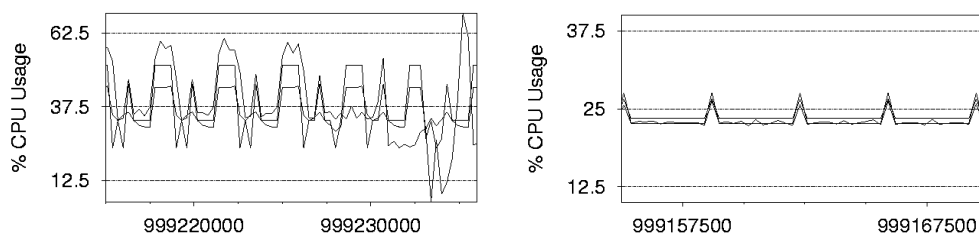


ABBILDUNG 2.55: Vorhersageergebnisse des Prozessorbedarfs für zwei Server aus einem HP-Rechenzentrum (durchgezogen: tatsächliches Signal, gestrichelt/gedurchgezogen: Vorhersagen)

Im Rahmen des Projektes werden drei Modellierungsansätze untersucht. Der erste, bereits implementierte und ausgetestete Ansatz findet statistisch signifikante, wiederkehrende Muster in dem Signal (z.B. dem historischen Prozessorbedarf). Auf dieser Basis werden dann Modelle des zukünftigen Signalverlaufes und die Vorhersagen erstellt. Abbildung 2.55 illustriert die Vorhersageergebnisse für zwei Server aus einem Rechenzentrum von Hewlett-Packard.

Der zweite Ansatz verwendet klassische Verfahren aus der Ökonometrie, speziell ARIMA-Modelle und den Kalman Filter. Das Besondere daran ist die Verwendung von multivariaten

Verfahren, die eine größere Eingabemenge als nur die Daten des Zielobjektes erlauben. So ist es möglich, bei der Vorhersage des Bedarfs einer Applikation innerhalb eines Clusters auch die historischen Daten der übrigen Applikationen als Eingabe zu verwenden, um so eventuelle Abhängigkeiten für eine genauere Modellierung auszunutzen.

Der dritte Ansatz verwendet Verfahren aus dem Bereich Machine Learning / Data Mining, insbesondere Klassifikatoren wie Naive Bayes oder Entscheidungsbäume. Auch hier können Eingabedaten aus mehreren Objekten für die Modellierung des Ziels verwendet werden. Zu diesem Zweck haben wir die klassischen Verfahren um zweistufige, automatische Selektion von Attributen (Funktionen von Eingabedaten) erweitert, um auch bei sehr großen Eingabemengen automatisch die relevanten Teile zu finden.

Als ein „Nebenprodukt“ dieses Projektes haben wir ein generisches Java-Framework entwickelt, das die Durchführung und Strukturierung von numerischen Experimenten (Simulationen) vereinfacht. Dieses Framework namens MetaLooper ermöglicht eine einfache Spezifikation von Parametern, Schleifen über diese Parameter, und Algorithmen, die bei den Simulationen verwendet werden. Durch die hohe Universalität kann dieses Framework auch in anderen Forschungsbereichen für parametrische Studien eingesetzt werden, oder für die schnelle Integration von mehreren Java-basierten Komponenten.

Publikationen

- [1] P. May, S. Barthel, I. Koch. *PTGL - a web-based database application for protein topologies*. Bioinformatics. Juni 2004.
- [2] P. May, T. Steinke, M. Meyer. *THESEUS: A Parallel Threading Core*. Proceedings of 12th International Conference on Intelligent Systems for Mol. Bio. (ISMB) and 3rd European Conference on Computational Biology (ECCB). Glasgow 2004, p.199.
- [3] T. Röblitz, F. Schintke, J. Wendler. *Elastic Grid Reservations with User-Defined Optimization Policies*. Workshop on Adaptive Grid Middleware, PACT 2004, Antibes, September 2004
- [4] A. Reinefeld, F. Schintke. *Dienste und Standards für das Grid Computing*. 18. DFN Arbeitstagung über Kommunikationsnetze, Düsseldorf, Lecture Notes in Informatics, In: J. von Knop, W. Haferkamp (Hrsg.), Series of the German Informatics Society (GI), 2004, vol. P-55, pp. 293 - 304.
- [5] S. Campadello, D. De Roure, B. Farshchian, M. Fehse, C. Goble, Y. Gui, M. Hermenegildo, K. Jeffery, D. Laforenza, P. Maccallum, J. Masso, T. Priol, A. Reinefeld, M. Riguiedel, D. Snelling, D. Talia, T. A. Varvarigou. *Next Generation Grids 2 - Requirements and Options for European Grids: Research 2005-2010 and Beyond*. NGG2 Report, Juli 2004.
- [6] L. Xiao, X. Zhang, A. Andrzejak, S. Chen. *Building a Large and Efficient Hybrid Peer-to-Peer Internet Caching System*. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, Vol. 16, Issue 6, pp. 754 - 769, Juni 2004.
- [7] A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt. *Scalable and Self-Optimizing Data Grids*. In: Annual Review of Scalable Computing, Kapitel 2 (pp. 30 - 60), vol. 6, Juni 2004. Singapore University Press.

- [8] A. Reinefeld, F. Schintke. *Grid Services - Web Services zur Nutzung verteilter Ressourcen*. Informatik Spektrum, April 2004, pp. 129-135, Springer-Verlag.
- [9] T. Schütt, A. Merzky, A. Hutanu, F. Schintke. *Remote Partial File Access Using Compact Pattern Descriptions*. IEEE/ACM Intl. Symp. on Cluster Computing and the Grid - CCGrid2004, April 2004, IEEE Computer Society.
- [10] F. Hupfeld. *Log-Structured Storage for Efficient Weakly-Connected Replication*. International Conference on Distributed Computing Systems (ICDCS) Workshops, Tokyo, März 2004.
- [11] J. Wendler, F. Schintke. *Grid-Enabled Computational Fluid Dynamics using FlowGrid*. Cracow Grid Workshop '03 Proceedings, pp. 59 - 66, Februar 2004, Academic Computer Centre CYFRONET AGH.

2.3 Auszeichnungen und Rufe

Martin Grötschel

- EURO Gold Medal 2004 (EURO – The Association of European Operational Research Societies)

Klaus Hildebrandt

- “Best Student Paper Award” (1. Platz) auf der Eurographics 2004 für das Paper “Anisotropic Filtering of Non-Linear Surface Features”, ausgelobt von IBM Research.

Konrad Polthier

- “Best Student Paper Award” (1. Platz) auf der Eurographics 2004 für das Paper “Anisotropic Filtering of Non-Linear Surface Features”, ausgelobt von IBM Research.

Jörg Rambau

- Ruf auf die C4-Professur „Wirtschaftsmathematik“ (Lehrstuhl) an die Universität Bayreuth

Andreas Tuchscherer

- Diplomarbeitspreis 2004 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR)

Tjark Vredeveld

- Ruf auf eine Assistenzprofessur „Operations Research“ an die Universität Maastricht, Niederlande

Stefan Zachow

- MedVis-Award (3. Platz), Karl-Heinz-Höhne-Preis für Medizinische Visualisierung, gestiftet von der Firma BrainLab, München

Wissenschaftliche Dienstleistungen

3.1 Überblick

Das Jahr 2004 kann rückblickend als ein Jahr der vorsichtigen Neuorientierung des Arbeitsbereiches Wissenschaftliche Informationssysteme bezeichnet werden. Der KOBV wandte sich mit der Einführung der *Balanced Scorecard* als neuem Controlling-Instrument verstärkt organisatorischen Fragen zu und konsolidierte gleichzeitig sein breites Spektrum an Internetdiensten.

Die auf den Themenbereich Mathematik im Internet fokussierenden Infrastrukturgruppen von Math-Net und Math&Industry arbeiteten auf die Erneuerung ihrer Suchtechnologien und Werkzeuge zur Gestaltung der Web-Präsenz hin.

Das Museumsprojekt konzentrierte sich auf neue Einsatzmöglichkeiten des „Conceptual Reference Models (CRM)“ des CIDOC in der Praxis.

Eine kleine Computeralgebra-Gruppe beteiligte sich anhand ihres Referenz-Systems REDUCE an der schrittweisen Einführung von Web-orientierten Konzepten aus der MathML- und der OpenMath-Umgebung.

Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV): Die Einführung der Balanced Scorecard ist die Antwort der KOBV-Bibliotheken auf die Empfehlungen aus der (positiven) Evaluation des KOBV, die Ende 2003 zum Abschluss kam. Sowohl die Ausgestaltung dieses neuartigen Controlling-Instrumentes für die Anwendung im eigenen Verbund, als auch die Definition der Startbedingungen für die Umsetzung in die Praxis erwiesen sich zunächst schwieriger als erwartet, konnten jedoch nach einer Reihe von Vereinfachungen gegen Jahresende 2004 erfolgreich zum Abschluss gebracht werden.

Die Balanced Scorecard soll nach dem Willen des KOBV-Kuratoriums nicht nur auf die KOBV-Zentrale angewandt werden, sondern auf den KOBV insgesamt. Darin liegt eine der größten Herausforderungen – trifft sie doch alle Bibliotheken – aber auch eine der stärksten Hoffnungen des KOBV.

Das Spektrum der inzwischen recht zahlreichen Dienste der KOBV-Zentrale für die KOBV-Bibliotheken und deren Nutzer spiegelt sich in der folgenden knappen Auflistung wider:

- KOBV-Internet-Dienste/KOBV-Portal
 - KOBV-Suchmaschine,
 - Digitale Bibliothek (digitale Ressourcen),
 - KOBV-Bibliothekenführer,
 - Verbundkatalog Film.

- Application Services
 - KOBV-Konsortialportal,
 - Dokumentenserver auf OPUS-Basis.
- Fernleihe/Dokumentenlieferung
- Organisatorisch/Technische Unterstützung
 - Metadaten-Austausch (Sharing),
 - Erschließung freier Internet-Ressourcen (kooperativ),
 - ZACK- und Z39.50-Support,
 - Sequentiell Verteilte Suche,
 - Fremd- und Normdatenserver.
- Nutzerorientierte Dienste
 - KOBV-Hotline,
 - KOBV-Informationsserver.

Das bundesweite Vorhaben „Verteilter Dokumentenserver (VDS)“ der Verbände, dessen Konzept auf dem „Verteilten Zeitschriftenserver (VZS)“ des KOBV beruht, ist inzwischen in *vascoda*, einem Internetportal für die Recherche wissenschaftlicher Information, integriert. Drei von fünf der in diesem Rahmen beantragten Projekte werden inzwischen vom BMBF und der DFG gefördert (am Bibliotheksservice-Zentrum Baden-Württemberg (BSZ), an der UB Freiburg, an der UB Regensburg) und ein neues Projekt für die zentrale *vascoda*-Suchmaschine enthält u. a. mit dem Internet-Robot FAST auch wesentliche Teile des VDS-Gesamtkonzeptes.

Das in diesem Zusammenhang vom KOBV bei der DFG beantragte Projekt „Virtueller Dokumentenspeicher (VDS des KOBV)“ wurde bedauerlicherweise jedoch mit Auflagen verbunden, die für das ZIB nicht annehmbar sind. Insofern muss der Versuch, für den VDS des KOBV Fördermittel einzuwerben, als erfolglos angesehen werden. Unbeschadet dessen wird die KOBV-Zentrale dieses Projekt aus eigener Kraft und mit auf die Region zugeschnittenen Mitteln (wie z. B. unter Einsatz eines *Open Source Internet Robot*) realisieren (laut Arbeitsplan 2005 etwa bis zur Jahresmitte).

IuK-Dienste für Mathematik und deren Anwendung in Industrie und Dienstleistungen: Die qualitative Weiterentwicklung der Math-Net-Dienste und der Ausbau des Informationsdienstes Math&Industry standen im letzten Jahr im Mittelpunkt der Arbeiten der Math-Net-Arbeitsgruppe.

Das Math&Industry-Projekt konnte im vergangenen Jahr erfolgreich abgeschlossen werden. Das BMBF hat ein Nachfolgeprojekt bewilligt, in dem die technische und die organisatorische Infrastruktur für die Web-Präsentation des BMBF-Mathematikprogramms weiter ausgebaut werden. Wichtige Ergebnisse des Projekts Math&Industry im vergangenen Berichtszeitraum waren:

- Standardisierte Web-Präsentationen der Projekte:
Alle Projekte der vier Perioden des BMBF-Förderprogramms verfügen inzwischen über eine eigene Web-Präsentation.

- Inhaltlicher Ausbau der Web-Präsentationen der Projekte:
Der Springer-Verlag hat zugestimmt, dass die Übersichtsartikel über die Projekte der ersten beiden Förderperioden, die in zwei Büchern erschienen sind, für die Web-Präsentation der Projekte genutzt werden können. Es wurde mit den Vorarbeiten begonnen, um diese Informationen ins Web zu stellen.
- Ausbau des zentralen Portals des Projekts Math&Industry:
Die Web-Präsentationen der Projekte wurden in das zentrale Portal integriert, und es wurden erste spezialisierte Informationsdienste aufgebaut, insbesondere ein zentrales Glossar, das zentrale Begriffe der Projekte enthält.
- die Bereitstellung von Tools im Netz:
Die für die Erstellung der Web-Präsentationen entwickelten Werkzeuge wurden auf dem zentralen Portal zum Download bereitgestellt.
- ein Konzept für die Softwareplattform:
Als eine erste Anwendung der in Math&Industry entwickelten Methodik außerhalb von Math&Industry wurde ein Konzept für eine Softwareplattform erarbeitet. Die Softwareplattform soll als Portal für die im DFG-Forschungszentrum MATHEON entwickelte Software genutzt werden.

Die Arbeiten am Math-Net wurden weitergeführt. Im Mittelpunkt standen Untersuchungen zur Suchmaschinentechnologie. Ziel ist es, die Informationen, die von den Institutionen, die sich am Math-Net beteiligen, auf ihren Servern bereitgestellt werden, möglichst vollständig und mit verbesserten Strategien für das Ranking (Positionierung einer Antwort in der Liste der Resultate einer Suche) und einer Math-Net-Klassifizierung präsentieren zu können.

Zu diesem Zweck wurde eine Auswahl von Suchmaschinen aus dem Public Domain-Bereich untersucht. Die Untersuchungen fließen in ein Konzept für die inhaltliche Weiterentwicklung und den Ausbau der Informationsdienste im Math-Net ein.

Dazu zählt auch ein Relaunch des Dienstes Math-Net-Links. Hierfür wurde ein neues Klassifikationsschema entwickelt.

Neben den erwähnten Aktivitäten werden weitere Community-orientierte Informations- und Kommunikationsdienste vom ZIB angeboten und administriert, insbesondere die elib-Softwarebibliothek oder die Opt-Net Mailing-Liste.

Computeralgebra: Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.8 des Computeralgebrasystems REDUCE fertiggestellt und der Vertrieb dieser Version im dritten Quartal aufgenommen. Diese neue Version nach REDUCE 3.7 aus dem Jahre 1999 enthält neben vielen Korrekturen und Verbesserungen wesentliche Erweiterungen der Pakete REDLOG und CRACK (von ZIB-Fellow Thomas Wolf).

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 (bis Juli 2004) 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. Über ein Thema aus diesem Bereich wurde eine Diplomarbeit angefertigt und deren Ergebnisse auf zwei Konferenzen vorgestellt.

3.2 Schwerpunkte

3.2.1 Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)

Bearbeitet von: Hildegard Franck, Martin Grötschel, Lavinia Hodoroaba, Andres Imhof, Uta Kaminsky, Zara Kanaeva, Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Markus Malo (ab 08/2004) Joachim Lügger, Christian Oesterheld (bis 05/2004), Raluca Radu, 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)

Nach der positiven Evaluation des KOBV Ende 2003 richtete sich im Jahr 2004 der Hauptfokus der organisatorischen Aktivitäten im KOBV darauf, die Modalitäten für die Weiterführung des KOBV zu regeln. In diesen Prozess waren sämtliche KOBV-Beteiligten involviert – angefangen von der KOBV-Zentrale und den Mitgliedsbibliotheken, über die Verbundgremien und die Unterhaltsträger bis hin zum ZIB-Verwaltungsrat. Ausgehend vom Evaluierungsgutachten erarbeitete eine kleine Arbeitsgruppe, bestehend aus Vertretern der Bibliotheken und der KOBV-Zentrale, die Strategien für die nächsten Jahre. Diese wurden vor ihrer Verabschiedung im Kuratorium einer breiten KOBV-Öffentlichkeit vorgestellt. So führte die KOBV-Zentrale, um eine hohe Transparenz in der Strategiediskussion zu schaffen, das 3. KOBV-Forum im Mai 2004 als offenen Strategie-Workshop durch. Um den Erfüllungsgrad der Zielsetzungen zu messen, hat das Kuratorium als Controlling-Instrument die Einführung der *Balanced Scorecard* ab Anfang 2005 beschlossen. Der ZIB-Verwaltungsrat hat in seiner Sitzung im Juli 2004 das KOBV-Strategiepapier, in dem die Zielsetzungen und das Controlling-Verfahren vorgestellt wurden, befürwortet und der weiteren Ansiedlung der KOBV-Zentrale am ZIB zugestimmt. Vor dem Hintergrund, dass das Kuratorium die Durchführung der nächsten KOBV-Evaluation auf Ende 2009 und die Bestimmung der Modalitäten für die Weiterführung des KOBV auf Ende 2010 festlegte, wurden im Laufe des Jahres verschiedene Vereinbarungen zum KOBV, die ursprünglich bis zum 31.12.2004 befristet waren, neu geregelt und bis Ende 2010 terminiert. Dies betraf insbesondere die Beitragsordnung und die Statuten.

Die KOBV-Zentrale hat die Internet-Dienste für die Nutzer im Jahr 2004 weiter optimiert und ausgebaut. Zentraler Einstiegspunkt ist seit Abschluss des Portal-Projektes im Dezember 2003 das KOBV-Portal – Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg. Bei Inbetriebnahme des Portals waren wesentliche Zielsetzungen des Projektes verwirklicht: Es bietet den Nutzern einen Überblick über die lizenzierten elektronischen Ressourcen – Datenbanken, Online-Kataloge, Linksammlungen und andere digitale Kollektionen – der KOBV-Bibliotheken. Dieser Nachweis ist noch nicht vollständig und wird weiter ausgebaut. Nahtlos, d. h. ohne erneute Suche, sind verschiedene Dienste abrufbar, unter anderem Online-Fernleihe, Dokumentlieferung, der Zugriff auf freie Volltexte und auf die Inhalte von circa 1.000 frei zugänglichen elektronischen Zeitschriften. Ergänzt wird dieser Service durch personalisierte Dienste, die beispielsweise die anonyme Selbstregistrierung, das Anlegen persönlicher Suchlisten sowie das Speichern von Suchanfragen und -ergebnissen für die spätere Wiederverwendung umfassen. Einen besonderen Stellenwert nimmt die KOBV-Suchmaschine ein, die softwaretechnisch ein integrierter Bestandteil des KOBV-Portals ist. Die KOBV-Zentrale hat Anfang 2004 die Einstiegsseite so überarbeitet, dass die Recherche in der KOBV-Suchmaschine sofort gestartet werden kann.

Damit hat sie den Wünschen zahlreicher Nutzer Rechnung getragen, bei denen der virtuelle Verbundkatalog als Werkzeug zum Durchsuchen der regionalen Kataloge inzwischen breite Akzeptanz genießt.

Einen weiteren Internet-Dienst, den Verbundkatalog Film, hat die KOBV-Zentrale im Berichtsjahr so weit abgeschlossen, dass bis zum Jahresende 2004 die Kataloge aller 13 Filmbibliotheken und Mediatheken, die am Hosting-Service teilnehmen, in den virtuellen Katalog eingebunden waren. Innerhalb von anderthalb Jahren ist damit im KOBV – mit einem absuchbaren Bestand von rund 200.000 Filmen (DVD, Videos) und 400.000 Bänden Filmliteratur – **das** Rechercheinstrument für Filme und Filmliteratur in deutschen Bibliotheken realisiert worden. Der virtuelle Katalog soll weiter ausgebaut und weitere Filmbibliotheken sollen für den Hosting-Service gewonnen werden. Dies ist nun möglich, nachdem das Kuratorium im Berichtsjahr zugestimmt hat, dass die KOBV-Zentrale das bis Ende 2004 terminierte Projekt „Hosting-Service des KOBV für virtuelle Fachbibliotheken“ in den Regelbetrieb überführt und ab 2005 routinemäßig betreiben kann. Künftig werden weitere Bibliotheken mit Spezialbeständen das Potenzial nutzen, das der Hosting-Service mit dem Aufbau virtueller Kataloge bietet: Auf Initiative der UB Potsdam haben im Jahr 2004 regionale Bibliotheken mit einem relevanten Judaica-Bestand gemeinsam mit der KOBV-Zentrale erste konzeptionelle Überlegungen für einen Verbundkatalog Judaica angestellt. Bereits zum Jahresende 2004 konnte die KOBV-Zentrale mit zwei Bibliotheken einen ersten Testbetrieb des Verbundkataloges Judaica realisieren.

Grundlegende Verbesserungen hat die KOBV-Zentrale im Berichtsjahr am KOBV-Bibliothekenführer vorgenommen. Als neue Softwarebasis dient das Ex Libris- Produkt Aleph 500, das die KOBV-Zentrale in Eigenentwicklung um eine Web- Katalogisierungsschnittstelle und eine Kommunikationsschnittstelle zur Bibliotheksdatei der Zeitschriftendatenbank (ZDB) ergänzt hat. Hat die KOBV-Zentrale mit der Inbetriebnahme des Bibliothekenführers Anfang 2002 den Nutzern ein modernes Rechercheinstrument zur Verfügung gestellt, so hat sie mit der neuen Version eine weitere Zielsetzung realisiert: Sie hat den Bibliotheken ein leicht handhabbares Arbeitsmittel zur Erfassung ihrer Bibliotheksdaten an die Hand gegeben, mit dem die Bibliotheken gleichzeitig Doppelarbeit, d. h. die Mehrfacherfassung ihrer Daten für unterschiedliche Bibliotheksverzeichnisse, vermeiden können. Die Pflege ist mittels der Web-Katalogisierungsschnittstelle denkbar einfach: Jede Bibliothek hat einen eigenen, Passwortgeschützten Eintrag im Bibliothekenführer, den sie selbst jederzeit nach Bedarf aktualisieren kann – die Änderungen sind im Internet sofort wirksam. Über die Kommunikationsschnittstelle wird jede Änderung automatisch an die Bibliotheksdatei der ZDB weitergegeben. Auf diese Weise braucht eine Bibliothek ihre Bibliotheksdaten nur noch an einer Stelle – im KOBV-Bibliothekenführer – zu pflegen. Im „neuen“ Bibliothekenführer findet der Nutzer inzwischen – unter **einer** Internetadresse und rund um die Uhr abrufbar – aktuelle Informationen zu 850 regionalen Bibliotheken. Der Zielsetzung, das Gesamtverzeichnis der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken mit ihren rund 1.000 Einrichtungen zu sein, ist der Bibliothekenführer damit ein gutes Stück näher gerückt.

Um die Bibliotheken noch stärker als bisher zu unterstützen und zu entlasten, betätigt sich die KOBV-Zentrale seit 2004 als Application Service Provider (ASP), d. h. sie betreibt und pflegt auf dem zentralen Server Software, die die Bibliotheken zum Aufbau lokaler Dienste nutzen können. Den Anfang bildete der Dienst „KOBV-Konsortialportal“, der die Einrichtung sowie technische Pflege und den Betrieb lokaler Portale umfasst. Hier agiert die KOBV-Zentrale als ASP für die Software MetaLib/SFX und nutzt gleichzeitig Synergien, die daraus

entstehen, dass MetaLib/SFX auch für das regionale Portal eingesetzt wird. Der Dienst erlaubt den beteiligten Bibliotheken, ihren Nutzern ohne großen lokalen Aufwand ein auf die lokalen Bedürfnisse zugeschnittenes Portal mit individueller Oberfläche, eigenen Ressourcen und Open-Linking-Diensten anzubieten. Im November 2004 ist die Universitätsbibliothek der Humboldt-Universität im Rahmen des KOBV-Konsortialportals mit drei lokalen Portalen in Produktion gegangen: UB-Portal, Clio (Fachportal für die Geschichtswissenschaft) und Evi-fa (Virtuelle Fachbibliothek Ethnologie). Die Universitätsbibliothek der Freien Universität hat im Oktober 2004 mit ihrem Open-Linking-Dienst SFX den Produktionsbetrieb aufgenommen; das lokale MetaLib-Portal läuft im Testbetrieb. Als weiteren ASP-Dienst baut die KOBV-Zentrale seit Ende 2004 einen neuen Service für die Bibliotheken auf: die Einrichtung sowie technische Pflege und den Betrieb lokaler Dokumentenserver. Dazu hat sie die Publikationsplattform OPUS auf dem zentralen Server der KOBV-Zentrale installiert. Mit der Dienstleistung stellt die KOBV-Zentrale den Bibliotheken eine Software mit integrierten Autoren- und Bearbeitungsworkflows zum elektronischen Publizieren der lokal produzierten Dokumente zur Verfügung. Die Bibliotheken können ihre elektronischen Dokumente auf dem KOBV-Server ablegen, wo diese regelmäßig gesichert und archiviert werden. Für die Bibliotheken, die den Dienst in Anspruch nehmen, bietet die KOBV-Zentrale als zusätzlichen Service den lokalen, regionalen und überregionalen Nachweis an. Auf diese Weise gibt sie den Bibliotheken ein Mittel an die Hand, um ihre lokalen Publikationen der regionalen und überregionalen Wissenschafts-Community zur Verfügung zu stellen.

Die KOBV-Zentrale hat im Berichtsjahr die Automatisierung der Fernleihe kontinuierlich auf weitere Bibliotheken ausgedehnt und insofern zu einem Teilabschluss gebracht, als die KOBV-interne Fernleihe flächendeckend realisiert wurde:

- Von den 20 fernleihberechtigten wissenschaftlichen Bibliotheken nehmen 18 Bibliotheken – das sind 90% – an der Online-Fernleihe teil. Die beiden verbleibenden Bibliotheken haben keinen Web-OPAC und verfügen damit nicht über die Grundvoraussetzung für die Teilnahme.
- Von den 40 fernleihberechtigten öffentlichen Bibliotheken nehmen 33 Bibliotheken – das sind ca. 80% – an der Online-Fernleihe teil. Sieben befinden sich im Test bzw. haben keinen Web-OPAC.

Sukzessive haben die wissenschaftlichen Bibliotheken im Berichtsjahr damit begonnen, die Fernleihe für ihre Endnutzer freizugeben. Bis Ende 2004 haben fünf Bibliotheken diesen Schritt getan: die Universitätsbibliotheken der BTU Cottbus (seit 19.07.2004), der EUV Frankfurt (Oder) (seit 04.10.2004), der TU Berlin (seit 18.10.2004) und der HU Berlin (seit 07.12.2004) sowie die Bibliothek der FH Brandenburg (seit 04.11.2004). Die Testläufe in der verbundübergreifenden Fernleihe konnten aufgrund eines Programmfehlers, dessen Eingrenzung und Behebung sich als sehr zeitaufwändig herausstellte, nicht wie gewünscht bis zum Ende des Jahres zum Abschluss gebracht werden.

Im Entwicklungsbereich hat die KOBV-Zentrale Anfang 2004 in Fortsetzung des Portal-Projektes das Projekt „Metadata-Sharing im KOBV-Portal“ aufgesetzt, um durch kooperative Erschließung und automatisierten Datenaustausch weitere freie und lizenzierte Ressourcen in das KOBV-Portal zu integrieren. Perspektivisch soll das KOBV-Portal als Zugangspunkt zu allen in der Region vorhandenen lizenzierten Ressourcen der Bibliotheken ausgebaut werden und darüber hinaus den direkten Zugriff auf relevante freie Ressourcen bieten. Aufbauend

auf Vorarbeiten im Portal-Projekt hat die KOBV-Zentrale im Projekt Metadata-Sharing im Wesentlichen die folgenden Komponenten bearbeitet:

- KOBV-Metadaten-Austausch-Parser (KMA-Parser): Entwicklung und Inbetriebnahme eines Werkzeuges zum automatisierten Austausch strukturierter Ressource-Metadaten.
- Metadaten-Schema: Festlegung von Konventionen zum Datenaustausch zwischen der KOBV-Zentrale und den KOBV-Bibliotheken als ein wesentlicher Bestandteil des KMA-Parsers.
- Metadata-Tool: Entwicklung eines Werkzeuges auf der Basis der MetaLib-Management-Oberfläche, das den Bibliotheken das Anlegen und Nachnutzen strukturierter Ressource-Metadaten erlaubt.
- Kooperative Erschließung freier Internetressourcen: Aufbau einer verteilten Fachredaktion im KOBV zur kooperativen Erschließung von Internetressourcen.

Während die KOBV-Zentrale im Berichtsjahr den Routinebetrieb mit dem KMA-Parser aufgenommen hat, konnte der Aufbau des Metadata-Tools – insbesondere aufgrund von Verzögerungen in der Auslieferung von MetaLib 3.x und verstärkt durch Unklarheiten im Hinblick auf MetaLib-Lizenzen – nicht in der gewünschten Form vorangetrieben werden. Dies hatte auch Auswirkungen auf den Aufbau der Fachredaktion, bei der ebenfalls das Metadata-Tool zum Einsatz kommen soll. Weder das Metadata-Tool noch die Fachredaktion konnten bis Ende 2004 realisiert werden, so dass das Projekt Metadata-Sharing im Jahr 2005 weitergeführt wird.

Das zweite Projekt im Entwicklungsbereich, das die langfristige Sicherstellung des Zugriffs auf lizenzierte elektronische Zeitschriften zum Ziel hat, wird ebenfalls über das Jahr 2004 hinaus fortgesetzt. Da der DFG-Projektantrag, den die KOBV-Zentrale im Rahmen des Projektes „Verteilter Dokumentenserver (VDS)“ der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme gestellt hat, nicht den gewünschten Erfolg brachte, wurde das Projekt modifiziert und wird in kleinerem Rahmen im KOBV weitergeführt. Die Daten des Kluwer-Servers, der bereits 2003 aufgebaut worden war, wurden im Berichtszeitraum neu indexiert und – in Zusammenarbeit mit dem Friedrich-Althoff-Konsortium – die Programme sowie ein erster Workflow für die Authentifizierung und Autorisierung entwickelt. Bis Ende 2004 konnte der Testbetrieb mit Zugriff auf den Kluwer-Server über das KOBV-Portal realisiert werden. In 2005 gilt es nun, den Workflow zu konsolidieren und in die Geschäftsgänge der KOBV-Zentrale zu integrieren, um eine langfristige Bereitstellung zu sichern. Dem Projekt wird weiterhin ein hoher Stellenwert auch für die deutsche Bibliothekslandschaft beigemessen: Das Verfahren, das im KOBV prototypisch anhand der Zeitschriften des Kluwer-Verlages und weiterer Verlage entwickelt wird, ist skalierbar und kann auf weitere Verbünde ausgedehnt werden.

Publikationen

- [1] L. Hodoroba, A. Imhof, M. Kuberek: *Das KOBV-Portal, elektronische Ressourcen in Berlin-Brandenburg: Nachweis, parallele Suche und weiterführende Dienste*, Bibliotheksdienst 38 (2004) Heft 9, S. 1055-1073
- [2] K. Braschoß, S. Hansmann, T. Hesse, U. Joosten-Wilke, U. Ristau, B. Rusch, V. Taylor: *Indexierung von Online-Katalogen: Ein gemeinsames Konzept der ALEPH-Anwender in Berlin*, Bibliotheksdienst 38 (2004), Heft 10, S. 1264-1282

- [3] J. Lügger, *Die Zusammenarbeit mit vascoda im Rahmen des Verteilten Dokumentenservers (VDS)*, Information Macht Bildung, 2. gemeinsamer Kongress der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e. V. (BDB) und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e. V. (DGI); Leipzig, 23.–26.03.2004; Seiten 98–116
- [4] J. Lügger, *Offene Navigation und Suchmaschinen in Verbänden, Konsortien und den Wissenschaften*; ABI-Technik, Heft 2, 2004, Seiten 104–121.

3.2.2 Suchmaschinentechnologien und Math-Net

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

Suchmaschinen und Suchmaschinentechnologien sind für das Web von enormer Bedeutung. Die Leistungsfähigkeit der bekannten Suchmaschinen des Internet mit Google an der Spitze ist beeindruckend: Selbst bei unpräzisen Anfragen finden die Suchmaschinen oftmals die gewünschte Information, und das bei sehr kurzen Antwortzeiten.

Mit den kommerziellen Suchmaschinen gibt es aber ein Problem: Die prinzipielle Arbeitsweise der Suchmaschinen ist bekannt, wie die Suchmaschinen aber tatsächlich arbeiten, ist Betriebsgeheimnis, angesichts der vielen Suchmaschinenoptimierer, die eine bessere Positionierung ihrer Web-Seiten in den Trefferlisten der Suchmaschinen anstreben und versuchen, die Ranking-Strategien der Suchmaschinen zu überlisten, sicher ein legitimer Akt der Selbstverteidigung. Viele Suchmaschinen beschränken sich auf die Auswertung der Volltexte. Die Antworten der verschiedenen Suchmaschinen unterscheiden sich mitunter beträchtlich, für die Anzahl der Treffer zu einer Anfrage wird nur eine ungefähre Zahl genannt, darunter können durchaus auch Objekte sein, die die Suchmaschinen kopiert hat, die aber im Original nicht mehr vorhanden sind. Viele Suchmaschinen beschränken ferner die Anzahl der Treffer, die sie anzeigen.

Die kommerziellen Suchmaschinen sind auf Dauer nicht ausreichend für den wissenschaftlichen Bereich, gerade auch unter dem Blickwinkel, dass Strukturinformationen für wissenschaftliche Informationen von außerordentlicher Bedeutung sind und über Suchmaschinen abrufbar sein sollten. Im Public Domain-Bereich stehen eine Reihe von Alternativen zur Verfügung.

Für Math-Net und Math&Industry wurde und wird gegenwärtig die Software Harvest eingesetzt. Mit dieser Software sind in den letzten Jahren in Math-Net einige Probleme aufgetreten, und die Pflege ist mit einem relativ hohen Arbeitsaufwand verbunden. Verschiedene andere Suchmaschinen, wie etwa Nutch oder Swish-e, könnten eine leistungsfähige Alternative sein.

Da die Qualität der Math-Net-Dienste und des Dienstes Math&Industry wesentlich durch die benutzte Suchmaschine bestimmt wird, wurde mit der systematischen Untersuchung der Leistungsfähigkeit der wichtigsten Suchmaschinen aus dem Public Domain-Bereich begonnen.

Anhand konkreter Testseiten aus dem Math-Net-Bereich werden derzeit die verschiedenen Suchmaschinen komponentenweise getestet. Zentrale Parameter sind Genauigkeit, Zuverlässigkeit, Flexibilität und Performance der Suchmaschinen. Das Ergebnis dieser Untersu-

chungen soll ein Konzept für den zukünftigen Einsatz von Suchmaschinen in Math-Net sein. In das Konzept sollen auch eigene Entwicklungen für das Ranking und die Klassifikation der Informationen eingebunden werden. Zentrale Math-Net-Dienste sollen im Anschluss an die Untersuchungen neu aufgebaut werden.

Neben den Arbeiten zu Suchmaschinen wurde ein Update der Math-Net-Links vorbereitet. Die Math-Net-Links waren einer der ersten Math-Net-Dienste und bieten mehr als 3.000 Links auf Mathematik-relevante Quellen im Netz. Das Schema, das für die Klassifikation der mathematischen Informationen verwendet worden ist, wurde grundlegend überarbeitet und enthält jetzt auch eine Klassifikation nach mathematischen Gebieten.

Die Fachgruppe Information und Kommunikation der DMV und ÖMG veranstaltete auf der DMV-Jahrestagung im letzten Jahr wieder ein Minisymposium. Der Schwerpunkt des Minisymposiums lag auf mathematischer Software. Das Spektrum reichte vom Aufbau von Portalen für Software bis hin zu Simulationen und Lernprogrammen, die über das Netz bereitgestellt und genutzt werden können.

Im Rahmen der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften wurden die Arbeiten des ZIB im Bereich des Math-Net und des Math&Industry-Projekts vorgestellt.

3.2.3 Math&Industry – Anwendungen der Mathematik im Web

Bearbeitet von: Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Robert Roggenbuck, Wolfram Sperber

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

Förderung: Bundesministerium für Bildung und Forschung BMBF

Das Projekt „Entwicklung und Aufbau des Internet-Dienstes Math&Industry“ wurde 2004 erfolgreich abgeschlossen. Alle Projekte des Mathematikprogramms der vier Förderperioden haben Web-Präsentationen, die als Minimum die formalen Daten des Projekte enthalten. Das in Math&Industry entwickelte Konzept der Web-Präsentation fand bei den Projekten breite Akzeptanz. Das zentrale Portal von Math&Industry¹ wurde ausgebaut, die Links auf die Präsentationen der Projekte wurden integriert und erste spezielle Suchmaschinen, insbesondere das zentrale Glossar, wurden aufgebaut.

Das BMBF hat im Sommer 2004 eine Anschlussförderung für das Math&Industry-Projekt genehmigt. Wesentliche Ziele des Anschlussprojekts sind:

- Weiterentwicklung des inhaltlichen, technischen und organisatorischen Konzepts für die Web-Präsentationen der Projekte,
- Aufbau einer personellen Infrastruktur, die die Erstellung und Pflege der Web-Präsentation der Projekte übernimmt (Informationsbeauftragte),
- die Weiterentwicklung der Werkzeuge, um eine flexible, intuitive und qualitativ hochwertige Erstellung der Web-Präsentationen der Projekte und die Auswertung der Informationen zu ermöglichen,
- Aufbau weiterer Informationsdienste im zentralen Portal, insbesondere einer Experten-datenbank, einer Produktdatenbank, eines Publikationsservers sowie von Forschungslandkarten,
- Integration der Informationen in bestehende Forschungsportale.

¹<http://www.mathematik-21.de>

Im Oktober fand ein erster Workshop mit den Informationsbeauftragten der Projekte statt. Natürlich kann mit dem Aufbau eines Netzwerks der Informationsbeauftragten in den Projekten nur erreicht werden, dass die Web-Präsentationen der derzeitigen vierten Förderperiode gepflegt und regelmäßig aktualisiert werden.

Um die Informationen über die Projekte der ersten beiden Förderperioden auszubauen, wurde mit dem Springer-Verlag eine Vereinbarung erzielt, die es erlaubt, die Artikel der bei Springer erschienenen Bücher über die ersten beiden Förderperioden im Volltext ins Netz zu stellen.

Das Projekt Math&Industry zielt darauf ab, die Informationen der Projekte des Mathematik-Programms des BMBF umfassend, anwenderfreundlich und in standardisierter Form im Internet bereitzustellen. Damit kann der Zugang zu den Informationen der Projekte entscheidend verbessert werden. Interessenten aus Industrie und Dienstleistungen können sich über die für sie relevanten Projekte informieren, Kontakte zu den Projekten aufnehmen und Projektergebnisse nutzen.

Der Schwerpunkt der Arbeiten im Math&Industry-Projekt lag im letzten Jahr auf:

- der Weiterführung der konzeptionellen Arbeiten für die Projekte, insbesondere für die Glossare,
- der Fertigstellung der Erstellungswerkzeuge für die lokalen Projektpräsentationen,
- dem Aufbau des zentralen Portals von Math&Industry.

Die Projekte der BMBF-Mathematikprogramme sind anspruchsvoll: Es geht um die wissenschaftliche Aufbereitung, Modellierung und Lösung realer Probleme aus Industrie und Dienstleistungen. Eines der wesentlichen Hindernisse für eine erfolgreiche Lösung der gestellten Aufgaben: Anwender und Wissenschaftler müssen eine gemeinsame Sprache finden. Natürlich stehen auch potentielle Interessenten vor dieser Hürde.

Glossare, die die wichtigsten Begriffe der Projekte umfassen, können dazu beitragen, die Sprachbarrieren schnell zu überwinden. Der Ansatz für das Glossar in Math&Industry beinhaltet:

- eine Definition der Begriffe,
- eine Zuordnung der Begriffe zum Anwendungsbereich oder zu einer Wissenschaft,
- eine Darstellung der Zusammenhänge mit anderen Begriffen.

Insbesondere der letzte Punkt, die Relationen zwischen Begriffen, kann sehr viel zur automatischen Verknüpfung verschiedener Projekte beitragen. Das setzt allerdings eine Beschränkung auf wenige zentrale Relationen voraus. Die inhaltliche Diskussion über die Glossare und die Entwicklung eines Werkzeugs zum Erstellen der Glossare war sehr zeitintensiv, konnte aber im letzten Jahr abgeschlossen werden.

Die Software für die Glossare ist Teil des WebSiteMakers, eines Werkzeugs, das die Erstellung einer vollständigen Web-Präsentation für ein Projekt ermöglicht.

Mittels des WebSiteMakers² werden

- (X)HTML-Seiten für die verschiedenen Punkte der Projektpräsentationen erzeugt,

²http://soft-pc3.zib.de/create_website

- Metadaten zu diesen HTML-Dokumenten erstellt (das geschieht in Form von RDF-Dateien, einem Web-Standard zur inhaltlichen Erschließung von Daten),
- eine Homepage für die Projektpräsentation generiert,
- die Navigationsleisten auf den Web-Seiten administriert.

Der WebSiteMaker wurde im letzten Jahr fertiggestellt und freigegeben. Es wurden damit Projekt-Präsentationen für die mehr als 50 Projekte der 3. Förderperiode des Mathematik-Programms des BMBF erstellt.

Diese Projekt-Präsentationen sind die Basis für den Aufbau des zentralen Portals von Math&Industry³.

Das zentrale Portal bietet verschiedene Navigationsmöglichkeiten über die Projekte, z.B. Listen der Projekte in den einzelnen Förderperioden. Auch eine Volltextsuche und das Browsen in einem zusammenfassenden Glossar aller Projekte sind implementiert. Weitere Funktionalitäten, etwa spezialisierte Suchmöglichkeiten über Publikationen, Software und andere Produkte der Projekte sowie eine Expertendatenbank, sind in Vorbereitung.

Publikationen

- [1] W. Sperber, R. Roggenbuck: *Knowledge Transfer between Mathematics and Industry via the Web: the Math&Industry Initiative*, Proceedings: New Developments in Electronic Publishing of Mathematics, Satellite Conference of the Fourth European Congress, 2004, Stockholm, Schweden

3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

Bearbeitet von: C. Saro, R. Stein, Ronni Grapenthin, Andrej Wunrau

Kooperationspartner: Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kulturbesitz (IfM), Bayerisches Nationalmuseum (BNM), Deutsches Historisches Museum (DHM), Deutsches Hygiene-Museum Dresden (DHMD), Museum im Wasserwerk (Friedrichshagen), Kunstsammlung der Dr. August Oetker KG (Bielefeld), Kulturhistorisches Museum Rostock, Stadtgeschichtliches Museum Leipzig, 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 dem 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 veranstaltete Herbsttagung zur Museumsdokumentation findet seit mehr als 10 Jahren traditionell am ZIB statt. Im Jahr 2004 wurde sie vom 18.–20.10.2004 durchgeführt. (Programm und Beiträge siehe <http://www.museumsbund.de>).

Die im Rahmen der genannten Fachgruppe Dokumentation gegründete Arbeitsgruppe „Datenaustausch“ wird von Mitarbeitern des ZIB koordiniert. Die Arbeitsgruppe beschäftigt

³<http://www.mathematik-21.de>

sich mit den Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten. Ein Ziel ist die Überprüfung der Praxistauglichkeit des vom CIDOC entwickelten objektorientierten „Conceptual Reference Model“ (CRM), das sich zur Zeit im Prozess der Normierung durch die ISO befindet (<http://cidoc.ics.forth.gr/index.html>). 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 im 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 Kooperationsvertrag. Weitere wichtige Kooperationsverträge gibt es mit dem Deutschen Historischen Museum (seit 1991), dem Bayerischen Nationalmuseum in München (seit 1995), dem Deutschen Hygiene-Museum Dresden (seit 1997), dem Museum im Wasserwerk Friedrichshagen (seit 1998) und dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig (seit 2001) sowie mit einigen anderen Museen. Die Arbeitsgruppe finanziert sich damit 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. Das Programm wird bereits seit 1981 vom ZIB weiterentwickelt und kostenlos an interessierte Museen weitergegeben.

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.

Ein Schwerpunkt bei der Entwicklung ist die möglichst vielseitige Verwendung einmal erfasster Daten. So werden die bei der Inventarisierung der Objekte gewonnenen Daten für verschiedenste wissenschaftliche und verwaltungstechnische Vorgänge genutzt (Ausstellungsvorbereitung, Leihverkehr, usw.). Ebenso können die Daten auf unterschiedlichen Medien (Papier, CD, Internet) zur Verfügung gestellt werden.

Die bereits im April 1996 (als erste derartige Anwendung in Deutschland) eingerichtete Internet-Datenbank des Deutschen Historischen Museums umfasst dank der kontinuierlichen Verbesserung und Erweiterung inzwischen über 330.000 Datensätze mit etwa 170.000 digitalisierten Objektbildern, siehe dazu:

<http://www.dhm.de/datenbank>. Sie bildet damit weiterhin das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Die Nutzung ist 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). Ähnliche Anwendungen wurden auch für das Deutsche Hygiene-Museum in Dresden (<http://www.dhmd.de>) und das Institut für Museumskunde (www.smb.spk-berlin.de/ifm) entwickelt.

Die in den Vorjahren entwickelte Intranet-Anwendung (am Deutschen Historischen Museum) wurde ebenfalls weiter ausgebaut. Sie ermöglicht einen sehr einfachen und schnellen Zugang zu der Originaldatenbank auch für Mitarbeiter, die mit der verwendeten Datenstruktur nicht vertraut sind, und wird besonders zur Ausstellungsvorbereitung intensiv genutzt. Vergleichbare Anwendungen wurden für das Deutsche Hygiene-Museum Dresden, das Stadtgeschichtliche Museum Leipzig sowie das Medizinhistorische Museum der Charité entwickelt.

Publikationen

- [1] R. Stein, C. Saro, et al., *Das CIDOC Conceptual Reference Model: Eine Hilfe für den Datenaustausch?*⁴ *Mitteilungen aus dem Institut für Museumskunde, Heft 31, ISSN: 1436-4166*

3.2.5 Computeralgebra (REDUCE)

Weiterentwicklung von REDUCE

Bearbeitet von: Winfried Neun, Herbert Melenk

Kooperationspartner: Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts, RAND, Santa Monica, Kalifornien, 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), Fritz Schwarz (FhG-SCAI, Bonn), Andreas Dolzmann, Thomas Sturm, Andreas Seidl (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 weltweitem Update). Im Berichtszeitraum wurde die Version REDUCE 3.8 fertiggestellt, die Software wurde im ersten Quartal 2004 freigegeben und ab dem dritten Quartal vom ZIB vertrieben.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Sein Programm MOLEC, das zusammen mit Mitarbeitern des TECFLAM-Projekts vor ca. 13 Jahren entwickelt wurde, befindet sich noch im Einsatz und wurde im Rahmen eines von der Universität Heidelberg und der TU Berlin geförderten Projekts auf neuere Hardware (Macintosh unter OS X) portiert.

In Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf wurden Arbeiten zur *parallelen Computeralgebra* 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

⁴http://cidoc.ics.forth.gr/docs/cidoc-paper_german.pdf

erstellt. Im Berichtszeitraum wurde der Beowulf Cluster erneut mit leistungsfähigerer Hardware nachgerüstet. Des Weiteren wurden für besonders große Berechnungen die Systeme des SHARCNet in Kanada genutzt. Thomas Wolf ist der lokale Koordinator für das SHARCNet an der Brock University.

Die *Präsentation des Systems im World Wide Web* (WWW) ist an vielen Serversystemen zugänglich. Eine neue Website wurde durch Anthony C. Hearn erstellt und dient seitdem als Referenz: <http://www.reduce-algebra.com>.

Spezielle Information für die Distributionen des ZIB findet sich auch bei:
<http://www.zib.de/SIS/Software>.

Die Information wird im Wesentlichen am ZIB, bei der Fa. Codemist (Bath, England) und bei RAND Corp., USA gepflegt. An der Umstellung der gesamten Information auf HTML bzw. Nachfolgeprodukten (wie OpenMath oder MathML) wird gearbeitet.

In Zusammenarbeit mit F. Schwarz vom FhG Institut SCAI und mit finanzieller Unterstützung durch die Fraunhofer Gesellschaft wurde am REDUCE ALLTYPES-Testserver im ZIB weitergearbeitet. Dieser Server soll Interessenten, die nicht über eine REDUCE-Installation verfügen, die Benutzung von ALLTYPES ermöglichen und so neue Kunden werben.

Im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft 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. Die Förderung des Projekts endete Mitte 2004; an einem Antrag für ein Nachfolgeprojekt wird gearbeitet.

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 2004) 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 3.8*, Santa Monica, 2004.

I3HP – Hadron Physics

Bearbeitet von: Stefan Wollny, Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: 48 europäische Institute, Koordination: Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Frascati, Italien

Förderung: Europäische Union

In der *Integrated Infrastructures Initiative Hadron Physics (I3HP)* haben sich über 2000 europäische Wissenschaftler zusammengeschlossen, um gemeinsam Forschungsarbeiten zur *stark wechselwirkenden Materie* durchzuführen. Dies umfasst Experiment, Theorie und Simulation. Insbesondere für die *Computational Hadron Physics* bietet das ZIB einen Teil seiner Massenspeicherkapazität zur europaweiten Nutzung an. Dadurch wird es für die beteiligten Physiker möglich, Zwischenergebnisse von äußerst aufwendigen Simulationen zentral zu speichern und von in Europa verteilten Orten auf diese Daten für weitere Analysen zuzugreifen.

Technisch wird der Zugang für die Nutzer durch Bereitstellung eines dedizierten Servers realisiert. Auf dem Server wird *dCache*⁵ als Basis-Software eingesetzt. Die Authentifizierung der Nutzer erfolgt über X.509-Zertifikate. Für die auf dem Gebiet der Computational Hadron Physics aktiven Wissenschaftler wird am ZIB neben der reinen Bereitstellung von Massenspeicher und Server eine Nutzerschnittstelle entwickelt, die es gestattet, Nutzdaten und beschreibende Metadaten zu verwalten. Dabei wird das Metadatenformat verwendet, das von der International Lattice Data Grid (ILDG)⁶ Initiative definiert worden ist.

⁵<http://www.dcache.org>

⁶<http://www.lqcd.org/ildg>

Supercomputing und Netze

4.1 Hochleistungsrechner am ZIB

Der Bereich Computer Science betreibt im Rahmen des HLRN-Verbunds (Kapitel 4.1.1) das im Jahr 2002 beschaffte massiv parallele System IBM pSeries 690. Zudem werden Archivdienste auf dem leistungsfähigen Datenspeicher StorageTek (STK) 9310 ACS angeboten.

4.1.1 Hochleistungsrechner Nord (HLRN)

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 und RRZN/Hannover 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 (Wartung, Strom, Klima, usw.) tragen sowie das erforderliche Personal bereitstellen.

Der HLRN-Supercomputer (der „Gesamtkomplex“, vgl. Abbildung 4.1) besteht aus den beiden gleichen Teilsystemen („Teilkomplexen“) in Berlin und Hannover sowie der dedizierten Datenverbindung („HLRN-Link“). Er bietet mit seinen insgesamt 1024 Power4-Prozessoren (Stand Dezember 2004) eine Spitzenleistung von über 5,3 TFlop/s. Im Laufe des Jahres 2004 wurden sechs weitere Regatta-H-Knoten mit insgesamt zusätzlichen 192 Prozessoren installiert, außerdem wurde das mit der Anfangskonfiguration installierte Colony-Netzwerk gegen den neuen, wesentlich leistungsfähigeren High Performance Switch (HPS, Federation-Netzwerk) ausgetauscht.

Die folgenden Angaben beziehen sich auf das Berliner Landeshochleistungsrechnersystem:

- Compute-Server: 16 Compute Server IBM pSeries 690 (Regatta-H) mit je 32 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz), davon 14 Systeme mit je 64 GByte, ein System mit 128 GByte und ein System mit 256 GByte Hauptspeicher. Die Mehrzahl dieser Systeme war ursprünglich jeweils in vier Partitionen aufgeteilt, dieses ist seit dem Umbau Mitte des Jahres nicht mehr notwendig: 14 dieser 16 Server werden als Systeme mit jeweils 32 Prozessoren, einem gemeinsamen Betriebssystem und einem gemeinsamen Speicher angeboten. Lediglich zwei der Systeme sind in zwei Partitionen unterteilt, um für Arbeiten der Jobvor- und -nachbereitung jeweils nur acht Prozessoren einzusetzen und die übrigen 24 auch für Rechenaufgaben nutzen zu können.
- Internes Verbindungsnetzwerk: High Performance Switch (HPS) (Federation Switch) bestehend aus zwei unabhängigen Netzwerkebenen. Dieses leistungsfähige Kommunikationsnetzwerk ersetzt das langsamere Colony-Netzwerk, welches mit der Anfangskonfiguration des Systems ausgeliefert wurde. Der High Performance Switch verfügt

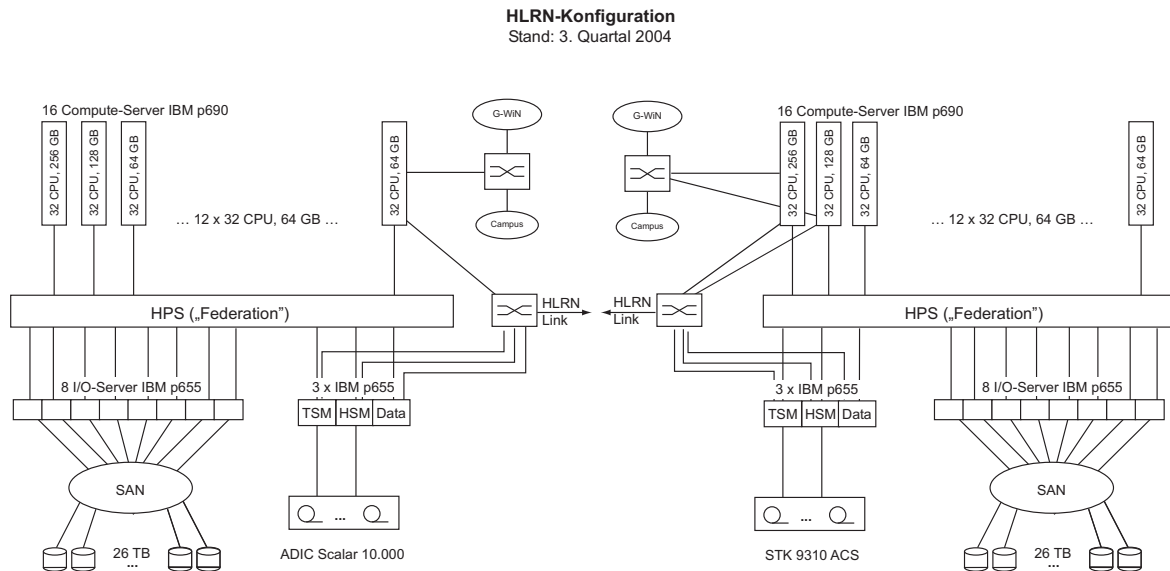


ABBILDUNG 4.1: Konfiguration des Berliner Landeshochleistungsrechnersystems

über folgende Leistungsmerkmale (in Klammern die entsprechenden Merkmale des Colony-Netzwerkes): Maximale Anwendungsbandbreite zwischen zwei Knoten: ca. 1000 MByte/s (280 MByte/s), Latenzzeit für den Transfer zwischen zwei Knoten: $< 5,4\mu\text{s}$ ($< 20\mu\text{s}$).

- I/O Server: Elf I/O-Server IBM pSeries 655 mit je vier Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz) für den Zugang zum parallelen Dateisystem, zu den Magnetbandsystemen, sowie für externe Datenzugriffe.
- Dateisysteme: 16 FAStT500 Fibre-Channel-Plattensysteme mit insgesamt 26 TByte Plattenkapazität, maximale I/O-Durchsatzleistung 1,7 GByte/s, aufgeteilt in unterschiedliche Dateisysteme für kurzfristige und langfristige Datenhaltung.
- Magnetbandarchivsystem: StorageTek (STK) 9310 ACS mit 15 Magnetbandgeräten vom Typ 9940 B mit einer Datenrate von je 30 MByte/s und einer Kapazität von 12.000 Stellplätzen für Magnetbandkassetten; derzeit für das HLRN-System neun Magnetbandstationen mit 900 Magnetbändern mit je 200 GByte Kapazität, insgesamt ca. 180 TByte.

Als Verbindung der beiden ca. 300 km voneinander entfernten Teilkomplexe dient ein angemieteter dedizierter transparenter WDM¹-Kanal des Gigabit-Wissenschaftsnetzes mit einer möglichen Bandbreite von 2,4 Gbit/s, derzeit wird Gigabit-Ethernet-Technik mit einer Bandbreite von 1 Gbit/s bei einer Latenzzeit von ca. 4,5 ms (Round-Trip) eingesetzt. Über den HLRN-Link werden die Dienste Datei-Transfer, direkte MPI-Kommunikation und das gemeinsame Scheduling-System „LoadLeveler“ auf der Basis von IP-Diensten mit privaten IP-Adressen genutzt.

Der Benutzer erreicht das HLRN-System über ausgezeichnete Einwählknoten („Login Nodes“) *berni.hlrn.de* und *hanni.hlrn.de*, welche über Gigabit-Ethernet-Verbindungen in die lo-

¹Wavelength-Division-Multiplexing, Wellenlängen-Multiplexing



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

kalen Netze von ZIB bzw. RRZN und damit über das G-WiN angebunden sind. Üblicherweise arbeitet der Benutzer interaktiv auf einem dieser Einwählknoten und sendet Batch-Jobs mit Angabe von maximaler Rechenzeit und gewünschter Anzahl von Prozessoren zum HLRN-System.

Das HLRN-System unterstützt folgende Methoden der Parallelisierung:

- Kommunikation über gemeinsamen Speicher (Shared-Memory-Modell): SMP-Parallelisierung ist für Anwendungen mit bis zu 32 Prozessoren unter OpenMP möglich.
- Kommunikation über Knotengrenzen hinweg (Distributed-Memory-Modell): Nachrichtenbasierte Kommunikation ist für Anwendungen mit sehr großem Parallelitätsgrad (bis zu 512 Prozessoren) unter MPI möglich.
- Kommunikation über den HLRN-Link: Zusätzlich zu diesem nativen MPI-Protokoll stehen für Anwendungen, die mehr als 512 Prozessoren benötigen, der dedizierte HLRN-Link mit MPI oder anderen Methoden über IP zur Verfügung.

Die Kommunikationsmethoden können auch kombiniert angewendet werden, beispielsweise in Form der Hybridparallelisierung, d.h. knoteninterne SMP-Parallelisierung und knotenexterne MPI-Nutzung auch über Komplexgrenzen hinweg.

Das HLRN-System wird als ein gemeinsames virtuelles System betrieben. Die Ein-System-Eigenschaft wird durch die folgenden Maßnahmen und Software-Mechanismen realisiert:

- gemeinsame Benutzerverwaltung,
- systemweite Bereitstellung der Heimat-Dateisysteme,

- Benutzerzugang über ein gemeinsames Batch-System (LoadLeveler),
- identische Versionen der eingesetzten System- und Anwendungssoftware.

Im Rahmen einer Kooperation mit IBM und dem DFN-Verein konnte das Projekt „Virtueller Supercomputer Berlin-Hannover“ im Jahre 2004 erfolgreich abgeschlossen werden, vgl. Kap. 4.3.1.

Schwerpunkt der Tätigkeit im Berichtszeitraum war die Umrüstung des internen Kommunikationsnetzwerks (Austausch des Colony-Netzwerks durch das leistungsfähigere HPS-Netzwerk) und damit verbunden der Upgrade auf das Betriebssystem AIX 5.2 (nunmehr mit einem vollen 64-bit-Kernel) einschließlich LoadLeveler Version 3.2 und dem Parallel Operating Environment (POE) Version 4.1.

Die im 2. Halbjahr 2003 durchgeführten Umbaumaßnahmen (vgl. Jahresbericht 2003) insbesondere mit der Verlagerung der I/O-Operationen auf separate Server haben sich hervorragend bewährt: Das Gesamtsystem konnte im 1. Quartal 2004 mit einer hohen Stabilität betrieben werden, die Gesamtzahl der Ausfälle hat sich drastisch reduziert, Ausfälle einzelner Teilkomponenten hatten in den meisten Fällen keine Auswirkungen mehr auf das Gesamtsystem, sondern ließen sich lokal begrenzen bzw. durch mehrfach vorhandene Komponenten abfangen.

Die Firma IBM hatte Anfang April im Teilkomplex Berlin drei weitere Regatta-Knoten sowie die notwendigen Komponenten für den leistungsfähigeren (Federation-Switch) High-Performance-Switch geliefert. Sie wurden als kleines Teilsystem zunächst separat mit aktueller Software und der neuen Switch-Hardware installiert. Dieses diente dann als Testsystem für die Umstellung des Gesamtsystems auf das neue Kommunikationsnetzwerk, schließlich auch für einzelne interessierte Benutzer.

Nach Erprobung des HPS-Testsystems wurde Ende Juni das Berliner System außer Betrieb genommen und in einer dreiwöchigen Umbauphase mit nunmehr 16 Regatta-Knoten und dem HPS-Switch Mitte Juli wieder in Betrieb genommen. Die entsprechenden Arbeiten für das System in Hannover wurden im August durchgeführt. Im Laufe der Monate August und September wurden auf beiden Systemen verschiedene Software-Versionen (Service Pack 7, 8 und 9) bereit gestellt. Zusammen brachten all diese Maßnahmen erhebliche Leistungsverbesserungen des Kommunikationsnetzwerkes, allein durch Verbesserungen der Software konnte die Latenzzeit für den Austausch von Daten zwischen zwei unterschiedlichen Rechenknoten von 12 auf $5\mu\text{s}$ verringert werden.

Die endgültige Abnahme des Systems erfolgte im 4. Quartal 2004: In den ersten Tagen des Oktober wurden zunächst eine Reihe von Leistungstests durchgeführt, hier konnten die mit der Firma IBM zuletzt vereinbarten Leistungen verifiziert werden. Anschließend erfolgte die 30-tägige Zuverlässigkeitsprüfung, das Gesamtsystem beider Teilkomplexe in Berlin und Hannover absolvierte diese Zuverlässigkeitsprüfung erfolgreich: die Verfügbarkeit des Systems lag bei 99,86 %.

Wegen der umbaubedingten Ausfälle des HLRN-Gesamtsystems konnten im 2. und 3. Quartal nur 38.200 NPL² bzw. 29.900 NPL für Großprojekte an die Benutzer abgegeben werden; im 1. Quartal waren es noch 40.800 NPL, im 4. Quartal schließlich mit der erweiterten Konfiguration 55.940 NPL - beides Quartale ohne Unterbrechungen durch Umbau oder Software-Upgrades.

²NPL - Norddeutsche Parallelrechner Leistungseinheit =32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

In der Betreuung dieses verteilten Systems durch Mitarbeiter an unterschiedlichen Standorten liegen die Schwerpunkte weiterhin neben dem eigentlichen Betrieb auch in der Erstellung einer ausführlichen weborientierten Benutzerdokumentation (<http://www.hlrn.de/doc/>), der intensiven Beratung der Benutzer durch Experten der jeweiligen Fachrichtung und einer automatisch erstellten weborientierten Information über den Status des Systems einschließlich seiner wichtigsten Komponenten (<http://www.hlrn.de/status/>).

Die vom Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN gemeinsam mit den Rechenzentren veranstalteten „HLRN-Workshops“ wurden fortgesetzt. Nach den Workshops „Quantenchemie/Dichtefunktionaltheorie“ im Juli 2003 unter Federführung des ZIB in Berlin und „Current Issues in Atmosphere/Ocean Modeling and Data Assimilation“ im Mai 2004 unter Federführung von AWI Bremerhaven und BremHLR fand im November 2004 der Workshop „Ingenieurwissenschaften“ (CFD, Strukturmechanik, etc.) unter Federführung des RRZN und der TU Clausthal im RRZN Hannover statt.

Das HLRN-System wird von den Wissenschaftlern in Norddeutschland sehr gut genutzt; das System ist stets voll ausgelastet. Die Nachfrage übersteigt deutlich die zur Verfügung stehende Kapazität.

Das Konzept der Verteilung des HLRN-Systems auf zwei Standorte, verbunden durch den dedizierten HLRN-Link, hat sich bewährt und wird während der Bereitstellung dieses Systems (mindestens bis ins Jahr 2007) beibehalten. Auch das geplante Nachfolgesystem HLRN-2 soll wieder über diese beiden Standorte verteilt betrieben werden, der HLRN-Link soll dann mit erhöhter Bandbreite (10 Gb/s) bei gleich guter Latenzzeit betrieben werden.

Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung des Hochleistungsrechners liefert die Tabelle 4.1.

	HLRN-System IBM pSeries 690
Betriebssystem	AIX
Systemsoftware	GPFS, LoadLeveler, PE, CSM
Compiler	XL C, Visual Age C++, XL Fortran
Programm-entwicklung	HPM, PAPI, TotalView, VaMPIr
Tools	ACTC Tools, Global Arrays, Linux Toolbox, METIS, MPI, netCDF, PVM, UDUNITS
Numerik	ATLAS, Aztec, BLACS, ESSL, FoSSI, GSL, LAPACK, MASS, NAG Fortran Library, PeIGS, PESSL, PETSC, RAMG, ScaLAPACK, WSMP
Visualisierung	Animation, EnSight, FERRET, GrADS, Ncview
Ingenieurwissenschaften	ABAQUS, Comet, CFX, FLUENT, GAMBIT, StarCD, ANSYS (teilweise nur <i>hanni</i>)
Chemie	CPMD, GAMESS-UK, Gaussian03, Gaussian98, GROMACS, MOLPRO, NAMD, NWChem, TURBOMOLE, VMD

Tabelle 4.1: Software-Ausstattung des Hochleistungsrechners

4.1.2 Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte

Wissenschaftlicher Ausschuss

Der vom Verwaltungsrat des HLRN eingesetzte Wissenschaftliche Ausschuss besteht aus elf Wissenschaftlern, die auf den relevanten Gebieten des HPC fachlich ausgewiesen sind; es sind alle am HLRN-Verbund beteiligten Bundesländer vertreten. Der Ausschuss bewertet die wissenschaftliche Relevanz jedes Forschungsvorhabens mit erheblichem Ressourcenbedarf (Großprojekt) und die Eignung der Aufgabenstellung für die Lösung mit Hochleistungsrechnern. Auf der Grundlage dieser Bewertung, des begründeten Ressourcenbedarfes und der im HLRN verfügbaren Kapazität teilt der Ausschuss Kontingente an Projekte für jeweils bis zu vier Quartale zu. Der Ausschuss hat nach seiner Konstituierung unter dem Vorsitz von V. Linke erstmalig im Februar 2003 über die Vergabe von Kontingenten an Großprojekte entschieden und tagt seitdem quartalsweise.

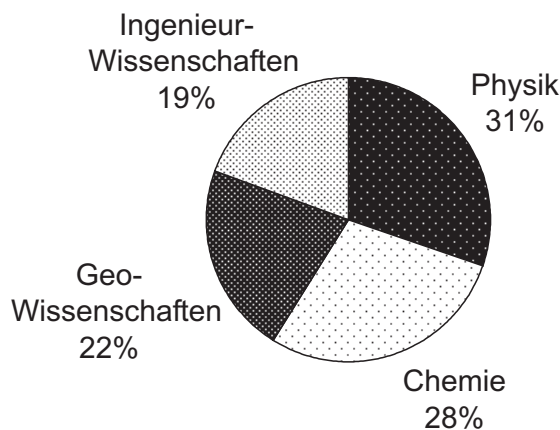


ABBILDUNG 4.3: Kontingenzuteilung des HLRN-Systems im Jahr 2004 nach Fachgebieten

Großprojekte Das HLRN-System wurde im Berichtszeitraum von 88 Großprojekten aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie sowie Geowissenschaften (insbesondere Meeres- und Umweltforschung) genutzt. Das anteilige Kontingent ist in Abbildung 4.3 aufgeführt. In der Erprobungs- und Vorbereitungsphase befinden sich auch Projekte aus bisher nicht vertretenen Fachgebieten wie Biologie, Bioinformatik, Elektrotechnik, Humanmedizin, Mathematik und Wirtschaftsinformatik. Der Gesamtbedarf übersteigt die vorhandene Rechenkapazität um ein Vielfaches. Das Antragsvolumen beträgt regelmäßig das Dreifache der verfügbaren Kapazität.

Den folgenden elf größten Projekten wurden auf dem HLRN-Rechner in den Quartalen 1/2004 bis 4/2004 insgesamt ca. 120.000 NPL³ bewilligt; das sind ca. 50% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Wissenschaftlichen Ausschuss bewilligten Rechenkapazität:

- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen*, HU Berlin, 16.168 NPL.

³NPL - Norddeutsche Parallelrechner Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

- Physik: *Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX*, Universität Hamburg, 14.125 NPL.
- Physik: *Determination of the Decay Constant of the D_s -Meson*, HU Berlin, 12.700 NPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Large Eddy Simulation von transitionellen Tragflügeln*, TU Berlin, 12.000 NPL.
- Chemie: *Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides*, HU Berlin, 10.496 NPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes*, TU Berlin, 10.355 NPL.
- Physik: *Topology, Chiral Physics and Hadron Masses from Overlap Fermions*, FU Berlin, 9.500 NPL.
- Geowissenschaften: *Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY*, Universität Bremen, 9.200 NPL.
- Physik: *Testing scaling and chiral properties of improved formulations of lattice QCD*, FU Berlin, 9.050 NPL.
- Geowissenschaften: *Untersuchung physikalischer Mechanismen zur Zellenverbreiterung und Organisation von Konvektion bei Kaltluftausbrüchen mittels hochauflösender Grobstruktursimulation*, Universität Hannover, 8.250 NPL.
- Geowissenschaften: *Simulation of Past, Present, and Future Climates*, Universität Kiel, 7.500 NPL.

Im folgenden werden die oben aufgeführten Großprojekte vorgestellt. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektbearbeitern bei Antragstellung verfasst worden.

Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen

Verantwortliche Wissenschaftler: J. Sauer, C. Tuma, Humboldt-Universität zu Berlin

Die Simulation heterogen-katalytischer Prozesse erfordert Kenntnisse über Elementarreaktionen. Dazu gehören Übergangsstrukturen, Reaktionsenergien, Energiebarrieren und Geschwindigkeitskonstanten.

Die Größe der Elementarzelle und die große Zahl von Atomen in der Elementarzelle erschwert die Berechnung mit quantenchemischen Methoden für Elementarreaktionen in Zeolithen.

Die QM/MM-Hybridmethode der Antragsteller soll zu einer QM/QM-Methode weiterentwickelt und benutzt werden, um im Rahmen der Theorie des Übergangszustandes Energiebarrieren und Geschwindigkeitskonstanten für Reaktionen (z.B. Protonensprünge oder Umwandlung von Kohlenwasserstoffen) in verschiedenen Zeolith-Umgebungen abzuschätzen.

Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX

Verantwortlicher Wissenschaftler: P. Hauschildt, Universität Hamburg

Wir berechnen hoch detaillierte Modelle von Stern- und Planetenatmosphären mit unserem state-of-the-art Programmpaket PHOENIX. Unsere Modelle von extrasolaren Gasplaneten (EGPs) sind weltweit führend und beinhalten nicht nur die Effekte von Staubbildung und Millionen von Moleküllinien auf die Struktur der Planetenatmosphäre sondern auch Effekte wie externe Beleuchtung durch den Elternstern des Planeten. Mit diesen Modellen können

wir sowohl beobachtete Spektren analysieren als auch Vorhersagen machen, die z.B. zu verbesserten Beobachtungs- und Detektionsstrategien für EGPs führen. Des Weiteren wollen wir unsere Modelle von Sternatmosphären, die für praktisch alle vorkommenden Sterntypen gültig sind, weiter verbessern und ausbauen. Dabei werden sowohl detaillierte Analysen also auch Modellgitter verwendet.

Zur Zeit berechnen wir z.B. Modellgitter zur Unterstützung des Instrumentendesigns des GAIA Satelliten, eine ESA Mission, die ca. 2010 gestartet werden soll. Zusätzliche Unterprojekte unserer PHOENIX Modelle sind die Simulation von Nova- und Supernova-Atmosphären, die Konstruktion von Opazitäts- und Zustandsgleichungstabellen für allgemeine Verwendung in der Astronomie und Entwicklung neuer Strahlungstransport-Algorithmen für 3D Medien mit relativistischen Geschwindigkeitsfeldern.

Das PHOENIX Team hat sein Hauptquartier in Hamburg und besteht zusätzlich aus internationalen Mitarbeitern in Frankreich (Lyon) und den USA (Oklahoma, Harvard, Arizona). Das Programmpaket besteht aus ca. 500.000 Zeilen Fortran 95, C++ und C Code, ist voll parallelisiert (MPI) und läuft auf IBM pSeries Maschinen sehr effizient.

Determination of the Decay Constant of the D_s -Meson

Verantwortlicher Wissenschaftler: U. Wolff, Humboldt-Universität zu Berlin

The problems we are concerned with arise from quantum chromodynamics (QCD), the theory which is widely believed to be governing the behavior of quarks. It describes how quarks join in groups of two or three and build particles, the so called hadrons. Two prominent representatives of these hadrons are the proton and the neutron, the particles the nucleus in an atom basically is built of.

In this project, we investigate the phenomenology of the pseudo scalar mesons D_s and B_s and of the vector mesons D_s^* and B_s^* , each of which contain a heavy and a light valence quark. The project is particularly focused on the minimisation of all systematic errors within the quenched approximation.

We have determined the decay constants F_{D_s} and $F_{D_s^*}$ and the difference in the masses between the pseudo scalar and the corresponding vector channel from the direct computer simulation of lattice QCD in large physical volume ($L \approx 1.5\text{fm}$). As an aside, the renormalisation group invariant charm quark mass M_c has been obtained from the simulation results.

Another essential objective of our project is the extrapolation of the decay constant in the continuum in $1/M_q$ towards heavier quarks. That means, into the range of B-physics where lattice data is still not reliable and also experimental data for F_B is hard to obtain.

A platform independent software was developed for the Monte-Carlo simulations of lattice QCD within the Schrödinger Functional. The code is written in C and uses the MPI-library for parallelism.

A number of simulations at different lattice constants has allowed for the extrapolation of all results to the continuum. From this data, one can directly extract the phenomenological observables for the $D_s^{(*)}$ -meson. Since direct simulations for the B_s - and the B_s^* -meson are not feasible due to the large mass of the b-meson, an interpolation in the meson mass to its physical point is performed for the decay constant and the mass splitting. The interpolation is carried out between the static limit $M_q \rightarrow \infty$ and the range of unphysical meson masses

of order m_{D_s} . The desired observables are therefore determined and extrapolated to the continuum limit for altogether six meson masses. The functional form of the subsequent interpolation in the meson mass to the static limit is guided by the prediction of the Heavy Quark Effective Theory (HQET). In order to apply it to the results in QCD, a set of conversion functions between HQET and QCD have been derived and evaluated numerically with input from results in perturbation theory.

Combined with results from experiment, such theoretical predictions for phenomenological observables from first principles are important for testing the Standard Model of elementary particles and for the search of physics beyond the Standard Model.

Large Eddy Simulation von transitionellen Tragflügeln

Verantwortliche Wissenschaftler: F. Thiele, St. Schmidt, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Berlin

Dieses Forschungsvorhaben zielt auf die Untersuchung von aerodynamischen Fragestellungen, wie z.B. der Vorhersage von instationären Ablösegebieten im Zusammenhang mit auftretender Transition, die mit herkömmlichen Methoden nicht oder nur sehr schwer zugänglich sind. Die gegenwärtigen Schwierigkeiten auf diesem Gebiet liegen in der Turbulenzmodellierung und der Erfassung der instationären Grenzschicht, die direkten Einfluss auf die Druckverteilung und die daraus resultierenden Strömungsparameter hat.

Gegenstand der numerischen Berechnungen ist ein transitionelles Tragflügelprofil (Onera A-Profil, Reynoldszahl $2.1 * 10^6$, Anstellwinkel 13.3 Grad, 15 Millionen Gitterpunkte), welches mithilfe der Grobstruktursimulation (Large-Eddy Simulation, LES) auf Basis eines Finite-Volumen Verfahrens untersucht wird. Das Programm erlaubt die Verwendung semi-strukturierter Mehrblockgitter, die eine blockweise Gitterverfeinerung zulassen. Der hohe numerische Aufwand in Form langer Simulationszeiten und enormen Speicherbedarfes macht die Verwendung von neuesten Rechnergenerationen und Rechnertechnologien unausweichlich.

Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides

Verantwortliche Wissenschaftlerin: M. V. Ganduglia-Pirovano, Humboldt-Universität zu Berlin

The goal of this project is to investigate structure and reactivity of transition metal oxides by performing DFT-calculations as implemented in the VASP code.

The systems are single crystal vanadia surfaces and models of supported vanadium oxide surfaces.

The task is to systematically investigate structure, electronic and vibrational properties of supported vanadium oxide aggregates of varying size to resolve the differences between single crystal and submonolayer quantities deposited on a second oxide. The ease of the vanadium reduction in these systems will be investigated.

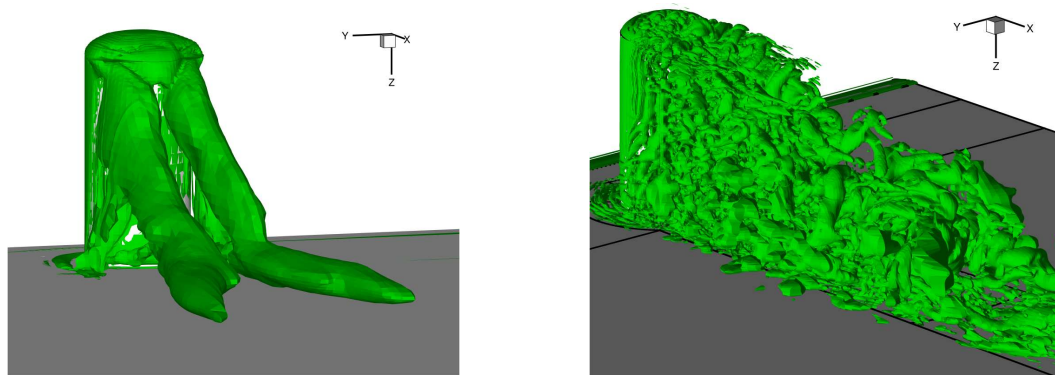
By combining DFT with statistical thermodynamics the stability of these systems in contact with a realistic environment (e.g. varying temperature and pressure) will be addressed.

Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes

Verantwortliche Wissenschaftler: F. Thiele, O. Frederich, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Berlin

Für die Strömung um einen Zylinderstumpf, der auf einer Endscheibe positioniert ist, soll das zeitlich-räumliche Strömungsfeld mit hochauflösenden Verfahren numerisch simuliert werden. Diese Strömungskonfiguration ist ein Referenzfall und Leitexperiment für das DFG-Schwerpunktprogramm „Bildgebende Messverfahren für die Strömungsanalyse“. Die Ergebnisse der Simulationen dienen als Datenbasis und Validierungsgrundlage für die durchzuführenden Experimente zur Strömungsvisualisierung.

Grundlage der Simulation sind die vollständigen strömungsmechanischen Bilanzgleichungen. Da eine Direkte Numerische Simulation (DNS) bei der vorliegenden Reynoldszahl von ca. 200 000 selbst auf gegenwärtigen Höchstleistungsrechnern nicht alle zeitlichen und räumlichen Skalen - insbesondere in Wandnähe - auflösen kann, bieten sich die Large-Eddy-Simulation (LES) sowie hybride Verfahren wie die Detached-Eddy-Simulation (DES) an. Die vorliegende Strömungskonfiguration kann mit strukturierten Gittern vernetzt werden. Dies macht eine Unterteilung des Strömungsfeldes in mehrere Blöcke relativ einfach und es lassen sich alle Vorteile ausnutzen, die sowohl Lösungsalgorithmen auf strukturierten Gittern als auch Domain-Decomposition für massiv parallele Rechner bieten.



a) zeitlich-gemittelt, DES

b) instationärer Schnappschuss, LES

ABBILDUNG 4.4: Visualisierung von Wirbelstrukturen (λ_2 -Isosflächen)

In Abbildung 4.4 sind die vorhergesagten Wirbelstrukturen (λ_2 -Isosflächen) verschiedener Simulationen zeitlich-gemittelt und instationär dargestellt. Während die Momentanaufnahme aus der hochauflösenden LES einen Eindruck über die feine Strukturierung der instationären Strömungsphänomene vermittelt, ist im ersteren Fall das detektierte Wirbelsystem schon bei geringerer Auflösung gut vorhergesagt. Die einzelnen Komponenten sind: (i) der Rezirkulationswirbel auf der Zylinderoberseite, (ii) die seitlich am Zylinder sich ablösenden Kopfwirbel, (iii) die Scherschichten aus der seitlichen Ablösung am Zylinder, (iv) die Rezirkulation auf der stromabgewandten Seite des Zylinders und (v) der Hufeisenwirbel in Bodennähe. Die im zeitlichen Mittel vorhergesagten Strömungsstrukturen sind im Schnappschuss nur schwer erkennbar, da die Strömung hochgradig instationär ist, und durch die hohe Gitterdichte sehr viele weitere Details aufgelöst werden. Insbesondere diese Komplexität und zeitliche Abhängigkeit

fürten zur Auswahl dieser Zylinder-Konfiguration, um Visualisierungsmethoden für solche Strömungen voran zu treiben.

Topology, Chiral Physics and Hadron Masses from Overlap Fermions

Verantwortlicher Wissenschaftler: V. Linke, Freie Universität Berlin

The project investigates the phenomenology of light hadrons in the framework of lattice quantum chromodynamics (QCD). Recently it has become possible to perform simulations with exactly chirally symmetric lattice fermions by employing Dirac operators which satisfy the Ginsparg-Wilson relation. The project makes use of the so-called overlap operator which provides one such solution. This kind of formulation of lattice QCD has considerable advantages over the traditional approaches like those with Wilson fermions. For instance, it is possible to simulate quarks with masses much closer to their physical values. These properties, however, go along with much greater numerical complexity and computational expensiveness: both CPU-time as well as memory requirements for overlap fermions exceed those for Wilson fermions by roughly two orders of magnitude.

The HLRN facilities made it possible to simulate at a physical volume of $(2.3 \text{ fm})^4$ and a lattice spacing of 0.1 fm thus reaching pion masses of 300 MeV. It was found that the pion mass dependence on the quark mass can well be described by quenched chiral perturbation theory. The Dirac operator spectral density follows the predictions of random matrix theory and was used to determine the chiral condensate.

Another topic of research within this project is the investigation of the structure of the nucleon. The HLRN supercomputer potential made it possible to compute the nucleon's axial charge which determines its beta decay properties. (For this kind of calculation it is very important to be able to simulate at large enough lattice volumes.) The results are in good agreement with experiment. Meanwhile the project focusses on the computation of the moments of the nucleon structure functions. Earlier calculations of these quantities with Wilson fermions had found large discrepancies to their experimental values. The project currently investigates whether these discrepancies vanish if a chirally symmetric action like the above-mentioned one is used.

Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY

Verantwortlicher Wissenschaftler: M. Vountas, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

Hintergrund dieser Beantragung stellen die Messungen des SCIAMACHY-Instrumentes (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography⁴) dar, welches weltweit erstmals weltraumgestützt die Erdatmosphäre abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie abtastet⁵. Diese technische Besonderheit wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhenauflösung und Verteilung verschiedener Spurengase zu bestimmen (auch in der Troposphäre), welche für eine ganze Reihe wissenschaftlicher Fragestellungen von besonderer Bedeutung sind. Insbesondere die Erfassung und Überwachung troposphärischer Brommonoxid- und Stickstoffdioxid-Konzentrationen eröffnet neue Möglichkeiten im Bereich Umweltmonitoring. Die Datenprodukte dienen der flächendeckenden und dauerhaften Überwachung von industriellen Emissionen und Biomassenverbrennung. Die resultierenden Datenprodukte lie-

⁴<http://www.sciamachy.de>

⁵ <http://www.iup.physik.uni-bremen.de/sciamachy/publication.html>

fern einen entscheidenden Beitrag zum Umweltmonitoring und sind in dieser Güte bisher nicht systematisch erstellt worden.

Die Validationsphase (diese hat signifikant von den Resultaten dieses HLRN-Projektes profitiert!) von SCIAMACHY Level 0- und 1-Daten ist weitestgehend abgeschlossen. Damit erhöht sich aber auch die Menge an verwertbaren Orbitinformationen.

Die bereitgestellte Rechenleistung wird sowohl der Validation der operationellen Level 2-Produkte dienen als auch die (langfristige) Erstellung von globalen Spurengaskarten und Profilen ermöglichen und damit die – noch vorhandene – Lücke in der Verfügbarkeit von höherrangigen SCIAMACHY-Datenprodukten schließen.

Neben der projektspezifischen (und validationsrelevanten) Bereitstellung von Daten dient das Projekt daher vor allem der wissenschaftlichen Gemeinde, die auf diese Weise mit Level 2-Daten versorgt wird (während die Qualität der offiziellen Level 2 Produkte noch problematisch scheint).

Testing scaling and chiral properties of improved formulations of lattice QCD

Verantwortlicher Wissenschaftler: V. Linke, Freie Universität Berlin

In this project quantum chromodynamics (QCD), the theory of strong interactions including the nuclear forces, is investigated. The only available method to comprehensively evaluate this mathematically very demanding theory is a *non-perturbative* treatment by means of Monte-Carlo simulations of a discretized version of it, called *lattice QCD*. Unfortunately such calculations become in general extremely costly in the region of small quark mass parameters, where the physical quantities assume their experimentally measured values. Recently a new version of lattice QCD with *twisted mass fermions* has been proposed, which looks most promising to overcome these difficulties. Twisted-mass lattice QCD has considerable advantages compared to the formulation conventionally used. In particular it is order(a)-improved, if its parameters are correctly tuned, i.e. the in principle unavoidable discretization errors vanish one order faster in the limit lattice spacing $a \rightarrow 0$ than in the standard version.

The aim of the project is to carefully investigate twisted-mass lattice QCD. Exploratory studies within the *quenched approximation* have yielded very promising results. In particular, a comparison to another recently proposed improvement of lattice QCD (*overlap fermions*) shows a reduction in computational costs by a factor up to 50 in favour of twisted mass fermions.

The success of the exploratory studies provided a sound basis for starting to tackle the much more challenging problem of treating the complete version (which compared to *quenched* goes under the key-word *dynamical quarks*). Up to now first clarifications of the phase structure of dynamical twisted mass lattice QCD have been obtained and led to surprising results. The simulations show evidence for a first order phase transition when the quark mass sweeps across zero, a result, which could be understood from a supporting calculation with chiral perturbation theory. This finding attracted a lot of attention at the world conference LATTICE 2004 at the Fermi National Accelerator Laboratory. In order to fully reveal and understand the phase structure of lattice QCD these studies will have to be extended to more and in particular smaller values of the lattice spacing. Eventually a detailed scaling test for mesonic quantities will be started and will lead to phenomenologically important results, to be compared with experimental measurements in elementary particle physics.

Untersuchung physikalischer Mechanismen zur Zellenverbreiterung und Organisation von Konvektion bei Kaltluftausbrüchen mittels hochauflösender Grobstruktursimulation

Verantwortlicher Wissenschaftler: H. Jansen, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Ziel des Projektes ist die detaillierte und möglichst realitätsnahe Simulation von Kaltluftausbrüchen im Hinblick auf offene Probleme bezüglich der Organisationsstruktur der Konvektion. Bei einem Kaltluftausbruch gerät sehr kalte Luft von Kontinenten oder Eisflächen her über vergleichsweise warmes Wasser und wird von der Oberfläche her aufgeheizt. Die sich ausbildende Konvektion nimmt anfänglich die Form von horizontal liegenden Rollen an, die in größerem Küstenabstand in hexagonale Zellen übergehen. Durch entsprechende Wolkenstrukturen (sogenannte Wolkenstraßen und Zellen) sind die Konvektionsmuster in Satellitenaufnahmen sehr gut erkennbar.

Trotz jahrzehntelanger Forschung sind bezüglich dieser Konvektionsformen noch eine Reihe von Fragen offen, z.B. die nach dem Aspektverhältnis der Zellen, definiert als das Verhältnis ihres Durchmessers zu ihrer Höhe. In der Natur beträgt dieses Verhältnis 10-30, während im Labor nur Werte von 3-4 beobachtet werden. Ebenso konnten die beobachteten Aspektverhältnisse bislang in numerischen Modellen nicht reproduziert werden. Außerdem ist unklar, warum manchmal offene (Abwindgebiete in Zellenmitte) und manchmal geschlossene Zellen (Aufwinde in Zellenmitte) beobachtet werden. Auch die Ursachen für die Entstehung von Wolkenstraßen und deren spätere Umwandlung in Wolkenzellen sind immer noch nicht eindeutig ermittelt.

In Modelluntersuchungen wurde Zellenverbreiterung durch Strahlungsabkühlung und freiwerdende latente Wärme beobachtet, ein entsprechender physikalischer Mechanismus ist aber noch nicht formuliert worden. Überdies ist zu klären, inwieweit der mittlere Wind oder die vertikalen Flussprofile verschiedener Variablen einen Einfluß auf die Entwicklung von Konvektionszellen und auf das Anwachsen von deren Aspektverhältnissen haben.

Entsprechende Fragen sollen mittels numerischer Simulation untersucht werden. Zu diesem Zweck wird das hochauflösende, parallelisierte Grobstruktursimulationsmodell PALM mit einem wolkenphysikalischen Modul eingesetzt, welches Verdunstungs- und Kondensations- sowie Niederschlagsprozesse durch einfache Parametrisierungen berücksichtigt.

Simulation of Past, Present, and Future Climates

Verantwortliche Wissenschaftler: M. Latif, N. Keenlyside, Institut für Meereskunde, Christian-Albrechts-Universität Kiel

A hierarchy of climate models will be used to perform simulations of past, present, and future climates with the overall aim to better understand the mechanisms for climate variability, and the limits of predictability. The pronounced decadal to multi-decadal variability of the North-Atlantic-European sector will be the focus of this work. In a suite of carefully constructed experiments the origins of this variability, its robustness, and its predictability will be investigated.

ENSEMBLES (EU): Among its goals is the development of a multi-model prediction system for seasonal to decadal time scales. Our participation involves the performance of decadal retrospective forecasts and to study the predictability on decadal timescales in the North-Atlantic-European sector.

MOTIF (EU): This project proposes a coordinated approach to use past states of the climate system as a demanding test of the capabilities and reliability of the latest generation of coupled ocean-atmosphere-vegetation general circulation models. Estimates of the climate at 6 ka and 21 ka using the ECHAM5/MPI-OM1 model coupled to a vegetation model will be produced.

DYNAMITE (EU): This project is on understanding the dynamics of the coupled climate system. Under this project we will perform atmospheric timeslice experiments at high (T106) resolution for present and future climate conditions.

SFB-460: Investigation of mechanisms of natural variability in the North-Atlantic-European sector with uncoupled and coupled simulations.

4.2 Fachberatung

Das Konzept der Fachberatung für die vom Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN empfohlenen Projekte hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt und wird fortgeführt. Jedem vom Wissenschaftlichen Ausschuss empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des HLRN zugeordnet. Vom ZIB sind folgende Mitarbeiter beteiligt:

<i>Anwendungsgebiet</i>	<i>Fachberater</i>
Chemie	Dr. Bernd Kallies
Bioinformatik	Dr. Thomas Steinke
Ingenieurwissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann
Physik	Dr. Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Dr.-Ing. Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Wilhelm Vortisch
Massendatenhaltung, Archivierung	Dr. Manfred Stolle

Tabelle 4.2: Fachberater im ZIB

Neben der Hilfestellung beim Antragsverfahren liegen die Hauptaufgaben der Fachberater in der Beratung bei algorithmischen Fragen, die der effizienten Nutzung des Systems dienen. Weiter geben sie Hilfestellung beim Einsatz von Softwarepaketen, bei der Parallelisierung und Optimierung vorhandener Software und in der Datenhaltung und erstellen umfangreiche Dokumentation zur Anwendungssoftware und zur Systembenutzung.

Die Schulung der Nutzer erfolgt durch Vorträge, Workshops und Kolloquien sowie Lehrveranstaltungen (z.B. zur Parallelisierung mit MPI und OpenMP) in Hochschulen. An der Schnittstelle zwischen Nutzern und HLRN-System leisten die Fachberater in Zusammenarbeit mit den Systemadministratoren einen entscheidenden Beitrag zur Optimierung des Systems (z.B. Datenhaltungskonzept) und zur Akzeptanzsteigerung, indem Erfahrungen und Anforderungen von Nutzern aufgegriffen und in Modifikationen des Systems umgesetzt werden (z.B. Batch-System: Fair Share Scheduling, Job-Klassen). Das IBM-System ist auch weiterhin, bedingt durch seine hohe Komplexität, sehr arbeitsaufwendig, weshalb ein beträchtlicher Anteil der Fachberatertätigkeit sich ungeplant auf teils sehr systemnahe Themen konzentrie-

ren musste.

Um den Empfehlungen des Wissenschaftsrats zum Höchstleistungsrechnen zu thematischen Verbänden in den Anwendungsfächern nachzukommen, werden im Rahmen von Workshops Nutzergruppen zusammengeführt, die an ähnlichen Fragestellungen oder mit gleichen Programmpaketen arbeiten. So wurden im Jahr 2004 Workshops zu den Themen „Current Issues in Atmosphere/Ocean Modeling and Data Assimilation“ in Bremerhaven und „Ingenieurwissenschaften (CFD/Strukturmechanik)“ in Hannover vom HLRN durchgeführt. Die Fachberater sind darüber hinaus über Gruppen ihres jeweiligen Fachgebiets in die Forschung eingebunden.

Die numerische und algorithmische Unterstützung der Projekte kann so gezielt verbessert werden. Gleichzeitig wird damit die Aus- und Weiterbildung auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens und der effizienten Nutzung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern gefördert.

Die engen Kontakte zwischen den einzelnen Fachberatern und den Anwendern aus den zugehörigen Fachgebieten bleiben eine entscheidende Voraussetzung für die erfolgreiche Durchführung der Projekte. Das ZIB koordiniert, unterstützt insbesondere durch das RRZN in Hannover, den HLRN-Support und führt regelmäßige Treffen zur gegenseitigen Information und Ausbildung der norddeutschen Fachberater durch.

Schwerpunkte bei der Organisation des über die sechs beteiligten Länder verteilten, dezentralen HLRN-Supports waren im Berichtsjahr

- die weitere Verbesserung und Pflege der technischen Infrastruktur und Nutzung elektronischer Kommunikationsmittel wie z.B. ein web- und datenbank-basiertes Trouble-Ticket-System,
- der Ausbau eines Dokumentationssystems einschließlich der notwendigen Webserver sowie
- das System zur Erzeugung, Verwaltung und Publikation von Nachrichten und Ankündigungen für die Benutzer.

Die auf dem IBM-System implementierten, vom Cray-System übernommenen Konzepte für eine stabile Benutzerumgebung (z.B. Modules-Konzept, Software-Distribution) haben sich bewährt und wurden weiter verfeinert.

4.2.1 Chemie und Bioinformatik

Der Fachberater Chemie betreut Nutzer mit fachlichem Schwerpunkt Chemie aus den Ländern Berlin, Mecklenburg-Vorpommern und Schleswig-Holstein. Chemie-Großprojekte hatten im Berichtszeitraum einen Anteil von 28% an der vom HLRN insgesamt abgegebenen Rechenleistung (s. Diagramm 4.3). Damit ist der Anteil der Chemie an der Nutzung des HLRN im Vergleich zum Vorjahr konstant.

Die überwiegende Mehrheit der Chemie-Projekte macht von den im HLRN angebotenen kommerziellen Softwarepaketen Gaussian, Turbomole und Molpro gebrauch. Dabei wirkt sich der Hauptspeicherausbau der IBM-p690-Plattform mit standardmäßig 64 GByte positiv auf die Akzeptanz aus. Der überwiegende Anteil der abgegebenen Leistung kommt allerdings durch die Nutzung massiv-paralleler Software wie CPMD und NAMD zustande.

Der Fachberater arbeitet wissenschaftlich mit den Arbeitsgruppen von Prof. R. van Eldik (Institut für Anorganische Chemie, Universität Erlangen) und Prof. H.-G. Löhmannsröben (Institut für Physikalische Chemie, Universität Potsdam) zusammen. Er ist außerdem Mitglied der Junior Research Group *Alignment and Threading on Massively Parallel Computers* des *Berlin Center for Genome Based Bioinformatics (BCB)*.

4.2.2 Geowissenschaften

Das Fachgebiet Geowissenschaften umfasst die Projekte aus dem Bereich Umweltwissenschaften einschließlich dessen Randgebieten Meteorologie, Klimaforschung, Atmosphärenforschung und Meereskunde.

Typische Anwendungen aus dem Bereich der norddeutschen Küstenländer sind mit weiteren großen Projekten auf den HLRN-Rechner gekommen. Besonders erwähnenswert sind dabei die stark auf dem HLRN vertretene Gruppe vom Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover und die Arbeitsgruppe vom Institut für Meereskunde der Universität Kiel, die ein Projekt zur Langzeitsimulation begonnen hat. Weitere große Projekte kommen vom Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock und von der Universität Bremen. Die geowissenschaftlichen Projekte haben 21% der abgebbaren Rechenzeit abgenommen.

Die Betreuung dieser Projekte haben weitgehend die Fachberater an den anderen am HLRN beteiligten Zentren übernommen.

4.2.3 Ingenieurwissenschaften

Die Nutzung der verfügbaren Rechnerressourcen des ZIB durch Großprojekte aus dem ingenieurwissenschaftlichen Bereich hat im Berichtsjahr deutlich zugenommen. Der abgenommene Rechenzeitanteil stieg von knapp 6% im Jahr 2003 auf 13% im Berichtsjahr und auf 20% im Januar 2005.

Wichtige Arbeitsgruppen haben lange mit dem Umstieg auf den HLRN-Rechner gezögert, da auf dem Zielsystem gute und vor allem stabile Produktionsbedingungen für eine zügige Portierung der Codes und Projekte zunächst noch nicht gegeben waren. Bereits der im 4. Quartal 2003 abgeschlossene I/O-Umbau der HLRN-Komplexe und der damit verbundene deutlich stabilere Betrieb hat den HLRN für ingenieurwissenschaftliche Projekte wieder interessant gemacht. Seit der Verfügbarkeit der endgültigen Netzwerkkonfiguration (Federation Switch ab Spätsommer 2004) werden auch massiv-parallele Anwendungen mit ihren für CFD-Codes oft typischen feingranularen Kommunikationsmustern wieder effizient genug bedient. Beide Ausbaumaßnahmen haben den HLRN als Arbeitsplattform für den Ingenieurbereich wieder etabliert. Dennoch setzen einige der Projekte weiterhin und verstärkt auf eigene PC-Cluster als zusätzliche Produktionsumgebung.

Die strömungsmechanischen Projekte (*Computational Fluid Dynamics*) arbeiten größtenteils mit selbstgeschriebenen Forschungscode, es kommen aber auch kommerzielle Pakete wie *Fluent*, *StarCD* und *CFX* zum Einsatz. Alle Pakete sind auf dem HLRN verfügbar.

Viele Projekte aus dem festigkeitsmechanischen Bereich arbeiten mit kommerziellen Paketen wie *ABAQUS* und *ANSYS*, die für die typischen Problemgrößen eine gute Performance auf dem HLRN-Rechner zeigen. Die Attraktivität und Nutzung von *ABAQUS* hat auch in diesem Berichtszeitraum weiter zugenommen.

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater eng mit der Arbeitsgruppe von F. 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*⁶ und Teilprojektleiter im DFG-Graduiertenkolleg 827 *Transportvorgänge an bewegten Phasengrenzflächen*⁷, die beide an der TU Berlin angesiedelt sind.

Im Ausbildungsbereich werden Kurse (MPI/OpenMP-Kurs, auch im Bereich des HLRN) und Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel Computing*) vom Fachberater durchgeführt.

4.2.4 Physik

Der von Physikprojekten im HLRN abgenommene Rechenzeitanteil ist im Berichtsjahr mit 31% etwa konstant geblieben. Der HLRN-Rechner ist damit ein unverzichtbares Arbeitsgerät für die norddeutschen Physiker.

Das Berichtsjahr stand im Zeichen des Hardware-Umbaus und der Endabnahme des HLRN-Rechners. Aufgaben des Fachberaters waren dabei das Erreichen eines stabilen Produktionsbetriebs sowie die Durchführung der Leistungsabnahme. Eine befriedigende Stabilität wurde nach Einspielen mehrerer Software *Service-Packs* erreicht.

Leistungsmäßig profitieren vor allem hochskalierende Anwendungen, d.h. Anwendungen, die mehrere Rechenknoten (Compute Server) benötigen, von dem neuen Kommunikationsnetzwerk (*High Performance Switch*, HPS). Innerhalb eines Knotens ist durch den Umbau die Speicherbandbreite um bis zu 8% geringer geworden, so dass kleinere Anwendungen häufig etwas langsamer laufen als vor dem Umbau. Das ist darauf zurückzuführen, dass die Knoten jetzt nicht mehr in vier Teile partitioniert sind. Auf einem Knoten können nunmehr in der Regel etwa 55 GByte *gemeinsamer* Speicher genutzt werden. Das entspricht etwa dem gesamten *verteilten* Speicher des Vorgängersystems Cray T3E am ZIB.

In der Leistungsabnahme wurde als gewichtete Leistung des HLRN-Benchmarks eine Rechenleistung von 355 GFlop/s erzielt. Vor dem Umbau betrug die im HLRN-Benchmark erzielte Leistung 250 GFlop/s. Die Leistungssteigerung wurde durch Nachlieferung von Rechenknoten sowie durch den Einbau des schnellen HPS erreicht. Der größte im HLRN-Benchmark ermittelte Beschleunigungsfaktor durch das schnelle Netz beträgt 1,6 für die gesamte Anwendung auf 256 CPUs. Dieser Faktor drückt die verbesserte Skalierung eindrucksvoll aus.

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater auf dem Gebiet der Gitterfeldtheorie mit den Gruppen von V. Linke (FU Berlin), M. Müller-Preußker (HU Berlin) und G. Schierholz (DESY Zeuthen) zusammen. Das Schwergewicht liegt auf der Weiterentwicklung des vom Fachberater geschriebenen Simulationsprogramms BQCD.

⁶<http://www.tu-berlin.de/fst/>

⁷<http://www.tu-berlin.de/fst/grk827/>

4.3 Weitverkehrsnetze

4.3.1 Virtueller Supercomputer Berlin-Hannover

Virtueller Supercomputer Berlin - Hannover

Bearbeitet von: Hubert Busch, Sebastian Heidl, Matthias Heyder, Thomas Röblitz, Hinnerk Stüben

Kooperationspartner: RRZN, IBM Deutschland GmbH

Förderung: DFN-Verein

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 Standorten ZIB und RRZN. Technisch handelt es sich bei dieser Verbindung um einen vom DFN-Verein gemieteten und von der Deutschen Telekom bereitgestellten „transparenten WDM-Kanal“ im G-WiN mit einer Übertragungsbandbreite von maximal 2,4 Gbit/s, der mit dem Gigabit-Ethernet-Protokoll mit 1 Gbit/s genutzt wird.

Sämtliche Knoten des HLRN-Systems einschließlich der Vorrechner (s. Abbildung 4.5) bilden über diese Verbindung ein gemeinsames IP-Subnetz.

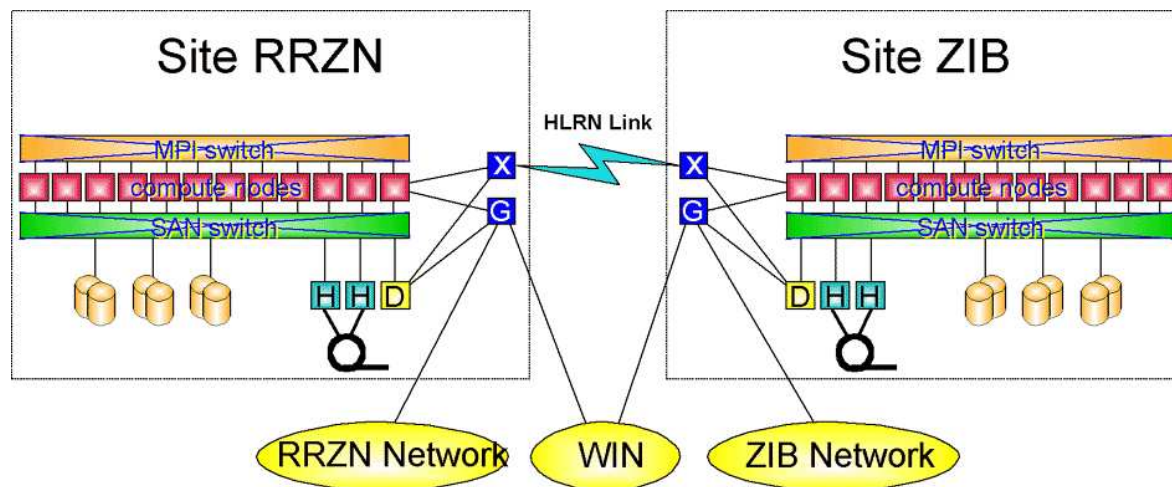


ABBILDUNG 4.5: Einbindung des HLRN-Links in das HLRN-Gesamtsystem

Im Rahmen einer Kooperation mit dem RRZN, dem DFN-Verein und der Firma IBM sind im Berichtszeitraum Untersuchungen über

- die quantitative und qualitative Nutzung des HLRN-Links,
- effektive Dateioperationen über den HLRN-Link,
- die Kopplung von parallelen Programmen und
- ein gemeinsames Ressourcen-Management-System

abgeschlossen worden. Der Abschlussbericht steht als Report des ZIB Nr. 04-57 (<http://www.zib.de/bib/pub/pw/index.de.html>) zur Verfügung.

Der DFN-Verein stellte während der Laufzeit des Projekts von Februar 2003 bis Februar 2004 die dedizierte Datenverbindung zwischen den beiden Teilsystemen in Berlin und Hannover ohne zusätzliche Kosten zu Verfügung. Die Ergebnisse des Projekts haben gezeigt, dass für den Betrieb dieses gekoppelten Systems eine solche dedizierte Datenverbindung mit garantierten Bandbreiten und insbesondere garantierten, nur durch die räumliche Entfernung gekennzeichneten, geringen Latenzzeiten unabdingbar ist. ZIB und RRZN nutzen diese Datenverbindung über das Projektende hinaus, nunmehr auf der Basis einer kostenpflichtigen Vereinbarung, zunächst bis zum Ende der Laufzeit des Gigabit-Wissenschaftsnetzes zum Jahresende 2005. Die Bandbreite der Verbindung von 1 Gb/s hat sich zunächst weiterhin als ausreichend gezeigt. Die Betreiber des HLRN-Systems sorgen allerdings auch durch geeignete Parametrisierung der systemseitigen Netzparameter, durch geeignete Werkzeuge für die Benutzer und durch Empfehlungen an die Benutzer für eine effektive Nutzung dieser Datenverbindung. Es hat sich erfreulicherweise gezeigt, dass auch für einzelne Anwendungen sehr hohe Datenraten erreicht werden können. Die erreichten Spitzenwerte liegen bei 123,5 MB/s ($\hat{=}$ 988 Mb/s bzw. 99,5 % der theoretisch möglichen Transferrate von 124,1 MB/s) bei synthetischen Werkzeugen (netperf) und bei 92,7 MB/s ($\hat{=}$ 741,6 Mb/s bzw. 74,7 %) bei realen Anwendungen mittels MPI-Kommunikation mit Hilfe von PACX-MPI – jeweils zwischen den Hauptspeichern übertragen – sowie 21,1 MB/s ($\hat{=}$ 168,8 Mb/s bzw. 17,0 %) beim Kopieren von einzelnen Dateien zwischen Plattenspeichern.

Die folgenden organisatorischen und technischen Festlegungen waren wesentlich für den Erfolg des Projekts:

- Gemeinsame Benutzerverwaltung: Jedes bewilligte Projekt und jeder zugelassene Benutzer erhalten auf dem Gesamtsystem gültige Kennungen. Jede Änderung einer Eigenschaft, sei es z.B. eine vom Benutzer selbst veranlasste Änderungen seines Passwortes oder eine von der Benutzerverwaltung veranlasste Änderung eines Limits, werden umgehend auf allen Rechnern des Gesamtsystems aktiviert.
- Eindeutiges Heimatverzeichnis: Jeder Benutzer kann den Ort seines Heimatverzeichnisses `/home/<benutzer>` nach seinen Erfordernissen selbst wählen. Der Zugriff zu Dateien im Heimatverzeichnis ist von beiden Seiten – außer bei Ausfall des zugehörigen Teilsystems – stets möglich.
- Gemeinsame Batch-Schnittstelle: Das Gesamtsystem verfügt über eine gemeinsame Batch-Schnittstelle, d. h. jeder Benutzer kann unabhängig vom Ort der Abgabe seines Jobs das ausführende Teilsystem wählen oder auch die Auswahl dem System selbst überlassen, so dass ein Lastausgleich erreicht werden kann.
- Jumbo-Frames und TCP-Fenstergröße: Wesentlich für die gute Ausnutzung der verfügbaren Bandbreite einer Datenverbindung mit den speziellen Eigenschaften des HLRN-Links (große Entfernung mit entsprechend hoher Latenzzeit) sind die Eigenschaften des erweiterten Gigabit-Ethernet-Protokolls, sowie die Möglichkeit der Anpassung der TCP-Fenstergröße. Während der Einsatz von Jumbo-Frames erst die Nutzung der vollen Bandbreite einer Gigabit-Ethernet Verbindung ermöglicht, ist die Veränderung der TCP-Fenstergröße zur Anpassung an die durch die große Entfernung bedingte hohe Latenzzeit erforderlich. Erst die Kombination beider Maßnahmen führte zur erfolgreichen Nutzung der vollen Bandbreite des HLRN-Links.

Während der Arbeit im Projekt hat sich herausgestellt, dass für den realen Betrieb folgende, über die ursprüngliche Planung hinausgehende, Arbeiten zu erledigen waren:

- Zeitnahe Status-Information an die Betreiber und die Benutzer über die Verfügbarkeit der Verbindung und der wichtigsten Dienste.
- Ersatzschaltung bei Ausfall der direkten Verbindung über einen Tunnel im Gigabit-Wissenschaftsnetz des DFN-Vereins mit geringerer Bandbreite und höherer Latenzzeit

Mit Abschluss des Projekts „Virtueller Supercomputer“ ist im HLRN nachgewiesen worden, dass ein gemeinsamer Betrieb eines verteilten Hochleistungsrechners von zwei unterschiedlichen Organisationen über 300 km hinweg erfolgreich durchgeführt werden kann. Notwendige Voraussetzungen sind dabei neben der dedizierten Datenverbindung mit ausreichender Bandbreite und insbesondere extrem kleiner Latenzzeit, eine gemeinsame Benutzerverwaltung sowie eine hohe Motivation der in beiden Einrichtungen mit dem Betrieb des Systems beauftragten Mitarbeiter.

4.3.2 Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN

Bearbeitet von: Hubert Busch, Renate Weidinger, Marek Fröhlich

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

Seit nunmehr 10 Jahren wird das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN (Berlin Research Area Information Network) von den Hochschulen und Forschungsinstituten sowie anderen öffentlichen Einrichtungen in Berlin als Hochgeschwindigkeitsdatennetz genutzt. Der offizielle Start von BRAIN war 1995, als durch einen Beschluss des Senats von Berlin den drei Universitäten des Landes und anderen großen Wissenschaftseinrichtungen die Möglichkeit eingeräumt wurde, über landeseigene Kabeltrassen einen Gemeinschaftsanschluss in dem vom Verein für ein Deutsches Forschungsnetz (DFN-Verein) damals errichteten Breitband-Wissenschaftsnetz B-WiN zu betreiben.

In der Folgezeit wurde das Netz kontinuierlich ausgebaut, d.h. es konnten Jahr für Jahr weitere wissenschaftliche und kulturelle Einrichtungen mit ihren Haupt- und Nebenstandorten an das BRAIN-LWL⁸-Netz angeschlossen werden (siehe Abbildung 4.6). Auch der Umfang der über BRAIN angebotenen Dienste wurde erweitert. Das physikalische Leitungsnetz von BRAIN ist Teil des vom IT-Dienstleistungszentrum Berlin ITDZ (früher: Landesbetrieb für Informationstechnik LIT) betriebenen Metro-Netzes, über das auch die einzelnen Standorte der Berliner Verwaltung erschlossen werden. Ein Kontingent von insgesamt 2000 km Faserstrecke ist auf dem Metro-Netz des Landes für BRAIN reserviert. Hinzu kommen einige interne Leitungen der Universitäten, die ebenfalls in das Netz integriert sind. Zentrales Planungs- und Steuerungsorgan für BRAIN ist die von der Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur eingerichtete BRAIN-Planungsgruppe. Sie besteht aus Mitarbeitern der Rechenzentren der drei Berliner Universitäten und des ZIB. Nach außen wird BRAIN in rechtlicher und wirtschaftlicher Hinsicht treuhänderisch vom ZIB vertreten, die BRAIN-Geschäftsstelle befindet sich ebenfalls im ZIB.

⁸LWL - Lichtwellenleiter

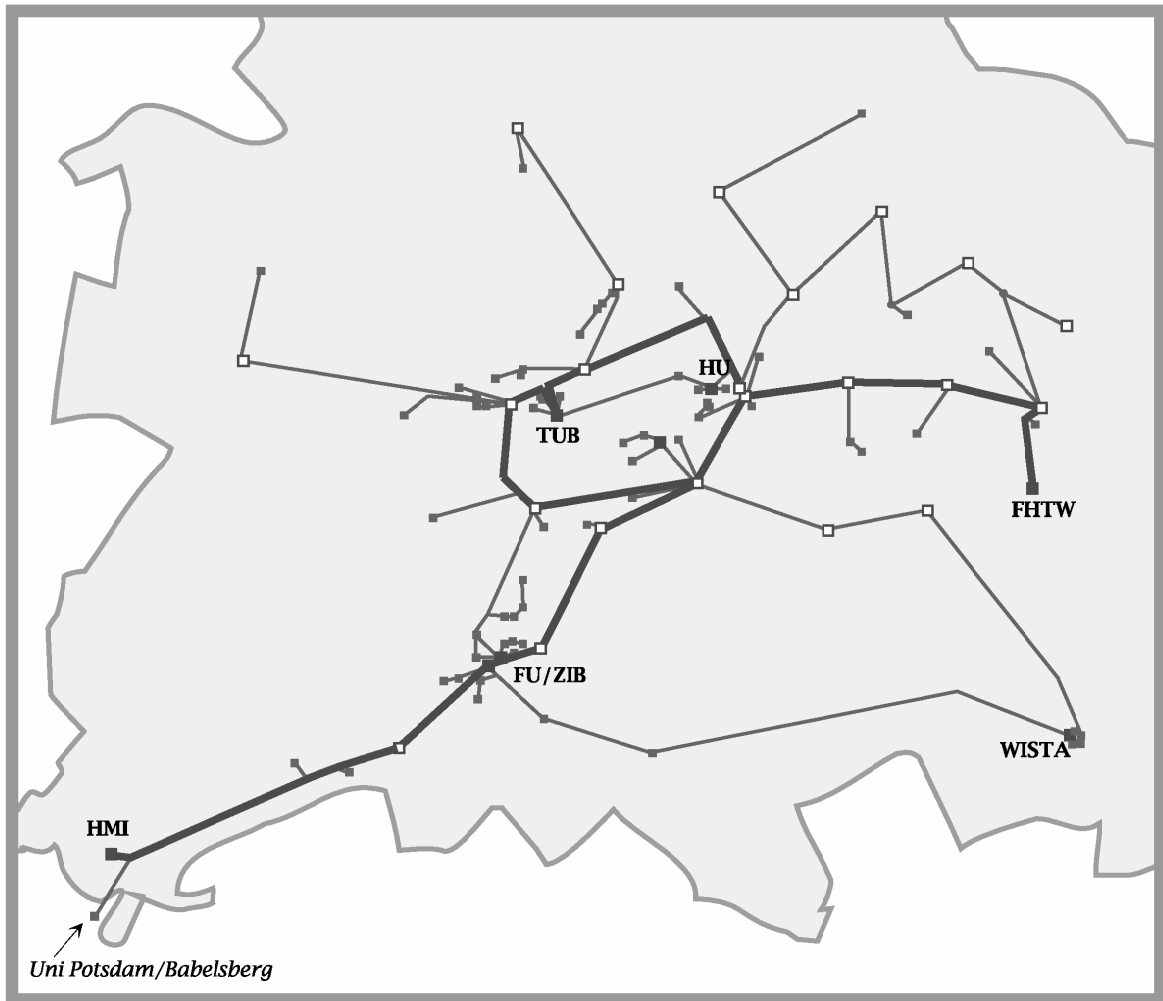


ABBILDUNG 4.6: Kabelplan mit Erweiterungen seit 1995 (die dicke Linie gibt das ursprüngliche Netz wieder)

Im Berichtsjahr sind folgende Anschlüsse hinzugekommen:

- zwei weitere Nebenstandorte für die Stiftung Preussischer Kulturbesitz,
- ein weiterer Nebenstandort der Universität der Künste,
- der Standort Eichborndamm der FU (FU-Archiv) und
- eine neue LWL-Strecke zwischen HU und TUB mit jeweils einer alternativen Einführung in das Campusnetz an beiden Universitäten.

Über das von BRAIN selbständig verwaltete Glasfasernetz werden vor allem solche Dienste angeboten, für die in der Region ein besonderer Bedarf besteht:

- Betrieb des regionalen G-WiN mit zusätzlichen Komponenten (ringförmiger Backbone zur Erhöhung der Sicherheit) in Zusammenarbeit mit dem DFN-Verein;

- Betrieb eines lokalen Netzes mit Gigabit-Ethernet-Technik und zentralem Netzwerkmanagement;
- Bereitstellung eines redundanten G-WiN-Zugangs (G-WiN-Backup) für am BRAIN-GE teilnehmende Einrichtungen; dieser Zugang kann genutzt werden, wenn es im primären G-WiN-Zugang der Einrichtung zu einer Störung kommt;
- Betrieb eines lokalen Netzes mit ATM-Technik;
- Bereitstellung von Glasfasern zur internen Vernetzung der in der Stadt verteilten Standorte einzelner Einrichtungen;
- Bereitstellung eines Zugangs zum Berliner Landesnetz über eine Direktverbindung zum ITDZ; dieser Zugang zum Intranet des Landes Berlin erlaubt den Verwaltungen der wissenschaftlichen Einrichtungen, direkt auf die Formulareserver im Landesnetz zuzugreifen.

Seit 2003 werden alle von BRAIN angebotenen Dienste in einem einheitlichen Vertrag zusammengefasst und die anfallenden Investitions- und Betriebskosten entsprechend der Nutzung auf die Teilnehmer umgelegt. Im Prinzip werden die hierfür geltenden Tarife für jedes Jahr neu ermittelt, wobei auch die Höhe der Förderung für Berliner Einrichtungen durch das Land eine entscheidende Rolle spielt. Tatsächlich hat sich jedoch an den seit 2003 geltenden Tarifen bisher nichts geändert.

BRAIN-GE – Berliner Gigabit-Ethernet-Verbund

BRAIN bietet den wissenschaftlichen Einrichtungen neben dem Anschluss an das G-WiN (G-WiN-Datenverkehr über BRAIN-Leitungen) die Möglichkeit, die lokalen Daten der in Berlin verteilten Standorte über BRAIN-LWL zu transportieren.

Nachdem im November 2003 die erfolgreiche Inbetriebnahme des neuen Gigabit-Ethernet-Backbone erfolgte, wurden im Berichtsjahr weitere Teilnehmer an den BRAIN-GE-Backbone angeschlossen, sowie weitere Dienste für die Teilnehmer etabliert. Das BRAIN-Verbundnetz ist ringförmig angelegt, verbindet die acht in Berlin verteilten Netzknoten über Gigabit-Ethernet miteinander und wird zentral gemanagt. Die Ringstruktur sowie zusätzliche Querverbindungen sorgen für Redundanz im Verbundnetz. Dadurch sind Unterbrechungen einzelner Backbone-Verbindungen (z.B. durch Leitungsschaden) für den Nutzer nicht spürbar.

Als Transportprotokoll im Backbone wird MPLS⁹ eingesetzt. Der Transport von Paketen erfolgt bei MPLS über zuvor festgelegte Pfade zwischen den Endpunkten. Jedes Paket wird dazu mit einem eigenen Label versehen, welches u.a. den Pfad, den das Paket durch den Backbone nimmt, bestimmt. Die Verwendung von MPLS als Transportprotokoll ermöglicht den Einsatz von Ressource-Reservation-Protokoll und Traffic Engineering¹⁰. Mit RSVP-TE lassen sich Verkehrsströme über festgelegte Stationen im Backbone lenken - so können Knoten mit hohem Verkehrsaufkommen gezielt umgangen und Engpässe vermieden werden. Durch RSVP lassen sich die von ATM bekannten Quality-of-Service-(QoS)-Eigenschaften auch für die angebotenen Dienste im Backbone nutzen - sei es für permanente Verbindungen zwischen zwei oder mehreren Standorten oder für temporär geschaltete Verbindungen. Für jede Verbindung kann eine Reihe von Qualitätsmerkmalen definiert und für die Dauer der Verbindung garantiert werden.

⁹Multi-Protokoll-Label-Switching, RFC 3031, RFC 3032

¹⁰RSVP-TE, RFC 3209

Im Rahmen ihrer Anbindung wird für jede Einrichtung ein eigenes Layer2-VPN (Virtual-Private-Network) aufgespannt. Ein Layer2-VPN separiert die Datenströme der Einrichtungen auf der untersten Protokollebene. Für die jeweilige Einrichtung steht scheinbar eine eigene LWL zur Verfügung - dies ermöglicht den Transport beliebiger Protokolle (Ethernet, IP, IPX, etc.) der Einrichtungen über den Backbone. Die darüber liegenden Verbindungen werden von den jeweiligen Einrichtungen selbst betreut. Der Anschluss an den Backbone erfolgt wahlweise über 100 Mbit/s oder 1000 Mbit/s Fiber-Ports pro Einrichtungsstandort.

Die einzelnen Verbindungen einer Einrichtung über den Backbone werden über Backup-Tunnel zusätzlich gesichert. Bei einer Leitungsstörung im Backbone werden die bestehenden Verbindungen in ca. 50-100 ms auf die Backup-Tunnel geschwenkt (Fast-ReRoute) - die laufenden Anwendungen der Einrichtung werden nicht unterbrochen.

Im Berichtsjahr konnte in Zusammenarbeit mit dem DFN-Verein der Dienst G-WiN-Backup in Betrieb genommen werden. Nutzern des G-WiN steht damit ein redundanter G-WiN-Zugang beim Ausfall ihres primären G-WiN-Zugangs über den zentralen DFN-Knoten im ZIB zur Verfügung. Unter der Voraussetzung, dass der G-WiN-Nutzer auch am BRAIN-GE-Backbone angebunden ist, kann dieser Dienst genutzt werden, ohne dass dem Teilnehmer zusätzliche Kosten entstehen.

Im letzten Quartal des Jahres wurde von der Stiftung Preussischer Kulturbesitz (SPK) bei einigen ihrer Standorte die Festnetztelefonie auf Voice-over-IP (VoIP) umgestellt. Dies erfordert eine Priorisierung von Sprachpaketen der SPK gegenüber normalen Datenpaketen im BRAIN-GE-Backbone. Mit Hilfe der MPLS-Technik liessen sich die entsprechenden QoS¹¹-Anforderungen der Stiftung zuverlässig erfüllen, so dass nach einer Testphase nun die gesamte Telefonie von drei Standorten über den BRAIN-GE-Backbone erfolgt.

Zum 31.12.2004 sind insgesamt 27 Standorte der folgenden Einrichtungen an den Gigabit-Ethernet-Backbone angeschlossen worden: Freie Universität Berlin, Technische Universität Berlin, Humboldt-Universität zu Berlin, Stiftung Preussischer Kulturbesitz, Universität der Künste, Deutsches Historisches Museum, Technische Fachhochschule, Hahn-Meitner-Institut, Fachhochschule für Technik und Wirtschaft, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin.

Ausblick

Im Jahr 2005 werden weitere Standorte der o.g. Einrichtungen sowie weitere Einrichtungen an den BRAIN-GE-Backbone angeschlossen. Ausserdem soll durch Einsatz von WDM-Technik das verfügbare Kabelkontingent effektiver genutzt werden. Für den Anschluss an das Internet wird zusätzlich zum G-WiN-Zugang der Anschluss über einen weiteren Internet-Provider geprüft. Dadurch wird ein echtes Multihoming mit allen seinen Vorteilen für die BRAIN-Teilnehmer möglich. Nach einer erfolgreichen Testphase im Berichtsjahr wird ausserdem eine dauerhafte Anbindung an den BCIX¹² angestrebt. Der Einsatz weiterer Server für die Überwachung der Backbone-Router soll die Verfügbarkeit und Zuverlässigkeit des BRAIN-GE-Backbone noch weiter erhöhen. Es wird geprüft, welche zusätzlichen Dienste für die BRAIN-Community einen Mehrwert darstellen und über die vorhandene bzw. zu erweiternde BRAIN-Infrastruktur etabliert werden können. Weitere Informationen zu BRAIN unter <http://www.brain.de>.

¹¹QoS - Quality of Service: Dienstgüte in Kommunikationsnetzen

¹²Berlin Commercial Internet Exchange

Publikationen

5.1 Preprints

Ein Verzeichnis aller Titel mit Abstracts ist im Anhang zu finden. Die Preprints sind über <http://www.zib.de/bib/pub> oder <ftp://ftp.zib.de/pub/zib-publications> abrufbar.

5.2 Mitherausgabe von Publikationen

Peter Deuffhard

- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Beijing, VR China
- Journal of Computers & Mathematics with Applications, Elsevier Science, Niederlande
- Numerische Mathematik, Springer, Berlin, Heidelberg
- Computing and Visualization in Science, Springer, Berlin, Heidelberg
- European Journal of Applied Mathematics, Cambridge University Press, United Kingdom

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
- European Journal of Applied Mathematics, Oxford University Press, Oxford, United Kingdom
- Mathematical Methods of Operations Research, Physica-Verlag (Springer-Verlag), Heidelberg
- Mathematical Programming A, Springer-Verlag, Berlin
- 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 (SMI), Springer-Verlag, Wien, Österreich

Hans-Christian Hege

- Book series “Visualization and Mathematics”, Springer-Verlag
- Video series “VideoMATH”, Springer-Verlag
- Special Issue of IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (TVCG) on Mathematical Visualization, 2004

Konrad Polthier

- Book series “Visualization and Mathematics”, Springer-Verlag
- Video series “VideoMATH”, Springer-Verlag
- Online Journal “Electronic Geometry Models”, www.eg-models.de, ZIB
- Special Issue of IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (TVCG) on Mathematical Visualization, 2004

5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

1. G. Allen, K. Davis, T. Goodale, A. Hutanu, et.al. *The Grid Application Toolkit: Towards Generic and Easy Application Programming Interfaces for the Grid* Proc. of the IEEE, Vol. 93:3, pp. 534-550, 2004
2. S. Alonso, R. Kähler, A. S. Mikhailov and F. Sagués: *Expanding Scroll Rings and Negative Tension Turbulence in a Model of Excitable Media*, Phys. Rev. E 70, 56201, 2004
3. A. Andrzejak, M. Ceyran, *Characterizing and Predicting Resource Demand by Periodicity Mining*, In: Journal of Network and System Management, special issue on Self-Managing Systems and Networks, Vol. 13, No. 1, März 2005.
4. W. Benger, H.-C. Hege, *Tensor Splats*, in: Visualization and Data Analysis 2004, Proc. of SPIE - Volume 5295, pp. 151-162, June 2004.
5. A. Bley, *On the Complexity of Vertex-Disjoint Length-Restricted Path Problems*, Computational Complexity **12** (2004), Seiten 131–149, auch als Report 98-20, ZIB, 1998.
6. A. Bley, T. Koch und R. Wessäly, *Large-scale Hierarchical Networks: How to Compute an Optimal Architecture?*, Tagungsband zum „11th International Telecommunications Network Strategy and Planning Symposium (Networks 2004)“, Wien, Juni 2004, Seiten 13–16, auch als Report 04-04, ZIB, 2004.
7. H.L. Bodlaender und A.M.C.A. Koster, *On the maximum cardinality search lower bound for treewidth*, Proceedings of International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, WG 2004, Lecture Notes in Computer Science, vol. 3353, 2004, Seiten 81–92.
8. ———, *Safe separators for treewidth*, Joint Proceedings of the workshop on Algorithm Engineering and Experiments (ALENEX'04) and the workshop on Analytic Algorithmics and Combinatorics (ANALCO'04) (New Orleans), SIAM Proceedings, 2004, Seiten 70–78.

9. H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster und T. Wolle, *Contraction and treewidth lower bounds*, Proceedings of 12th Annual European Symposium on Algorithms, ESA 2004, Lecture Notes in Computer Science, vol. 3221, 2004, Seiten 628–639.
10. I.L. Bogolubsky, V.K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, A.V. Sergeev, H. Stüben, *Polyakov loops and Binder cumulants in $SU(2)$ theory on large lattices*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 129&130 (2004) pp. 611–613.
11. R. Borndörfer, *Combinatorial Packing Problems*, The Sharpest Cut – The Impact of Manfred Padberg and His Work (M. Grötschel, Hrsg.), SIAM, 2004, 19–32.
12. A. Brandt und M. Brandt, *On the two-class M/M/1 system under preemptive resume and impatience of the prioritized customers*, Queueing Syst. **47** (2004), 147–168.
13. K. Braschoß, S. Hansmann, T. Hesse, U. Joosten-Wilke, U. Ristau, B. Rusch, V. Taylor, *Indexierung von Online-Katalogen: Ein gemeinsames Konzept der ALEPH-Anwender in Berlin*, Bibliotheksdienst 38 (2004), Heft 10, S. 1264–1282.
14. S. Burger, R. Klose, R. März, A. Schädle, F. Schmidt und L. Zschiedrich, *Efficient Finite Element Methods for the Design of Microoptical Components*, Proceedings of the MOC04 (2004), J8.
15. S. Campadello, D. De Roure, B. Farshchian, M. Fehse, C. Goble, Y. Gui, M. Hermenegildo, K. Jeffery, D. Laforenza, P. Maccallum, J. Masso, T. Priol, A. Reinefeld, M. Riguigel, D. Snelling, D. Talia, T. A. Varvarigou, *Next Generation Grids 2 - Requirements and Options for European Grids Research 2005-2010 and Beyond*, NGG2 Report, <http://www.cordis.lu/ist/grids/pub-report.htm>, July 2004.
16. P. Deuffhard: *Buchbesprechung: Geometric Numerical Integration (E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner)*. In: Jahresbericht der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV), Band 106, Heft 3, pp. 43 (2004).
17. P. Deuffhard, R. Hochmuth: *Multiscale Analysis of Thermoregulation in the Human Microvascular System*. Math. Meth. in the Appl. Sci. 27, pp. 971-989, Wiley Verlag (2004).
18. P. Deuffhard, Ch. Schütte: *Molecular Conformation Dynamics and Computational Drug Design*. In: J.M. Hill, R. Moore (eds), Applied Mathematics Entering the 21st Century, Invited Talks from the ICIAM 2003 Congress, Sydney, Australia, pp. 91-119 (2004).
19. P. Deuffhard, M. Weber: *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*. In: M. Dellnitz, S. Kirkland, M. Neumann and C. Schütte (eds.), Linear Algebra and its Applications: Special Issue on Matrices and Mathematical Biology, Vol 398C pp. 161-184 (2004).
20. D. Draheim, W. Neun, and D. Suliman, *Classifying Differential Equations on the Web*, Proceedings of MKM 2004 – Third International Conference on Mathematical Knowledge Management, LNCS 3119, Springer, 2004.
21. D. Draheim, W. Neun, and D. Suliman, *Finding and Analyzing Mathematical Formulae in MathML and OpenMath on the Web*, (V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov, Hrsg.), Proceedings of the 7th Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing, Institut für Informatik, Technische Universität München, ISBN 3-9808546-2-0, Juli 2004.

22. K. Ehrhardt und M. C. Steinbach. KKT Systems in Operative Planning for Gas Distribution Networks. *PAMM*, 4(1):606–607, 2004.
23. A. Eisenblätter, A. Fügenschuh, H.-F. Geerdes, D. Junglas, Th. Koch und A. Martin, *Integer programming methods for UMTS radio network planning*, Proc. of WiOpt'04 (Cambridge, UK), 2004.
24. ———, *Optimization methods for UMTS radio network planning*, Operation Research Proceedings 2003, Springer, 2004, Seiten 31–38, auch als ZIB-Report 03-41, 2003.
25. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, U. Türke und Th. Koch, *Momentum data scenarios for radio network planning and simulation (extended abstract)*, Proc. of WiOpt'04 (Cambridge, UK), 2004.
26. M.J. Fleuren, H. Stüben, G.F. Zegwaard, *MoDySim – A parallel dynamical UMTS simulator*, in: G.R. Joubert, W.E. Nagel, F.J. Peters, W.V. Walter (Hrsg.), *Parallel Computing: Software Technology, Algorithms, Architectures and Applications*, Elsevier, pp. 347–354.
27. C. Fouard, G. Malandain, S. Prohaska, M. Westerhoff, F. Cassot, C. Mazel, D. Asselot, and J.-P. Marc-Vergnes, *Skeletonization by blocks for large 3D datasets: Application to brain microcirculation*, IEEE International Symposium on Biomedical Imaging: From Nano to Macro (ISBI'04) (Arlington, Virginia), April 2004, pp. 89-92.
28. C. Fouard, G. Malandain, S. Prohaska, M. Westerhoff, F. Cassot, C. Mazel, D. Asselot, and J.-P. Marc-Vergnes, *Squelettisation par blocs pour des grands volumes de données 3D: application à la microcirculation cérébrale*, Reconnaissance des Formes et Intelligence Artificielle (RFIA 2004) (Toulouse, France), January 2004.
29. E. Gladilin, S. Zachow, P. Deuffhard, and H.-C. Hege. Anatomy- and physics-based facial animation for craniofacial surgery simulations. *Medical & Biological Engineering & Computing*, 42(2):167–170, 2004.
30. M. Grötschel, *Cardinality Homogeneous Set Systems, Cycles in Matroids, and Associated Polytopes*, The Sharpest Cut: The Impact of Manfred Padberg and His Work (Martin Grötschel, Hrsg.), Series on Optimization 4, MPS-SIAM, 2004, 99–120.
31. H. Haberl, B. Hell, M. Zöckler, S. Zachow, H. Lamecker, A. Sarrafzadeh, B. Riecke, W.R. Lanksch, P. Deuffhard, J. Bier, and M. Brock. Technical aspects and results of surgery for craniosynostosis, *Zentralbl. Neurochir.*, 65(2):65–74, 2004.
32. M. Hasenbusch, K. Jansen, D. Pleiter, H. Stüben, P. Wegner, T. Wettig, H. Wittig, *Benchmarking computer platforms for lattice QCD applications*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 129&130 (2004) pp. 847–849.
33. H.-C. Hege, T. Weinkauff, S. Prohaska, and A. Hutanu, *Distributed visualization and analysis of fluid dynamics data*, Proc. 4th Int. Symp. Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration (Sendai, Japan), pp. 145-150, 2004.
34. H.-C. Hege, *Aktuelle Anwendungen der Wissenschaftlichen Visualisierung (Current Applications of Scientific Visualization)*, *Information Technology* 46(3), 142-147, 2004.
35. H.-C. Hege and K. Polthier. *Mathematical Visualization*. Special Section of IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics. IEEE Computer Society, 2004.

36. Th. Hierl, S. Zachow, G. Wollny, G. Berti, and J. Fingberg. Concepts of computer-based simulation in orthognathic surgery. *Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery*, 32(suppl 1):81–82, 2004.
37. Th. Hierl, S. Zachow, G. Wollny, G. Berti, J.-G. Schmidt, and J. Fingberg. Computer-based simulation in distraction osteogenesis. In *Proc. of 3rd Int. Oxford Distraction Symposium of the Craniofacial Skeleton*, S. 33–34, 2004.
38. K. Hildebrandt and K. Polthier. Anisotropic filtering of non-linear surface features. *Computer Graphics Forum*, 23(3):391–400, 2004.
39. R. Hochmuth, P. Deuffhard: *Multiscale Analysis for the Bio-Heat-Transfer Equation – The Nonisolated Case*. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences (M^3AS), 11 (14) 2004.
40. L. Hodoroaba, A. Imhof, M. Kuberek, *Das KOBV-Portal, elektronische Ressourcen in Berlin-Brandenburg: Nachweis, parallele Suche und weiterführende Dienste*, Bibliotheksdienst 38 (2004) Heft 9, S. 1055–1073.
41. I. Horenko, M. Weiser, B. Schmidt, C. Schütte, *Fully Adaptive Propagation of the Quantum-Classical Liouville Equation*, J. Chem. Phys. **120** (2004), 8913–8923.
42. F. Hupfeld, *Log-Structured Storage for Efficient Weakly-Connected Replication*, International Conference on Distributed Computing Systems (ICDCS) Workshops, Tokyo, März 2004.
43. E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler, M. Müller-Preussker, A. Sternbeck, H. Stüben, *A numerical reinvestigation of the Aoki phase with $N_f = 2$ Wilson fermions at zero temperature*, Phys. Rev. D69 (2004) 074511.
44. M. Joswig und M. E. Pfetsch, *Optimizing discrete morse functions*, Electronic Notes in Discrete Mathematics **17** (2004).
45. A. Ali Khan, T. Bakeyev, M. Göckeler, R. Horsley, D. Pleiter, P.E.L. Rakow, A. Schäfer, G. Schierholz, H. Stüben, *Accelerating Hasenbusch’s acceleration of Hybrid Monte Carlo*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 129&130 (2004) pp. 853–855.
46. C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *An Application of Adaptive Finite Element Techniques in Biomechanics: Simulation of the Human Mandible*, Proc. 22. CAD-FEM Users Meeting 2004 - Internationale FEM Technologietage, Dresden (2004).
47. C. Kober, B. Erdmann, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *The Influence of the Masticatory Muscles on the Structural Behaviour of the Human Mandible*, eingereicht bei Proc. 11th Workshop, “The Finite Element Method in Biomedical Engineering, Biomechanics and Related Fields”, Univ. of Ulm (2004).
48. C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Anisotropic Simulation of the Human Mandible*, Proc. EM2004, June 13-16, Univ. of Delaware, Newark, USA (2004).
49. C. Kober, B. Erdmann, J. Lang, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Sensitivity of the Temporomandibular Joint Capsule for the Structural Behaviour of the Human Mandible*, in Proc. BMT2004, Ilmenau, Deutschland, Biomedizinische Technik 49 (2004) Ergänzungsband 2, 372–373.

50. C. Kober, B. Erdmann, J. Lang, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Adaptive Finite Element Simulation of the Human Mandible Using a New Physiological Model of the Masticatory Muscles*, PAMM **4** (2004), 332–333.
51. Th. Koch, *The final NETLIB-LP results*, Operations Research Letters, **32:2** (2004), 138–142.
52. Th. Koch und R. Wessälly, *Hierarchical Infrastructure Planning in Networks*, in Carl-Friedrich Elmer, Christian von Hirschhausen (Hrsg.): Proceedings of the 3rd Conference on Applied Infrastructure Research, 9. October 2004, Berlin, <http://wip.tu-berlin.de/workshop>, 2004.
53. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Minimum converter wavelength assignment in all-optical networks*, Proceedings of ONDM 2004, The 8th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling, 2004, Seiten 517–535, Gent, Belgien.
54. S. Krofczik, D. Mueller, A. Klawitter, A. Maye, and R. Menzel: *Compiling functional and neuroanatomical features of individual neurons into a standard atlas of the bee brain apis mellifera*. FENS Forum Abstracts (2), A193.5 (2004)
55. S. O. Krumke, N. Megow und T. Vredeveld. How to whack moles. In *Proceedings of the 1st Workshop on Approximation and Online Algorithms*, LNCS 2909, pages 192–205. Springer, Berlin, 2004.
56. J. Lügger, *Die Zusammenarbeit mit vascoda im Rahmen des Verteilten Dokumentenservers (VDS)*, Information Macht Bildung, 2. gemeinsamer Kongress der Bundesvereinigung Deutscher Bibliotheksverbände e. V. (BDB) und der Deutschen Gesellschaft für Informationswissenschaft und Informationspraxis e. V. (DGI), Leipzig, 23.–26.03.2004, Seiten 98–116
57. J. Lügger, *Offene Navigation und Suchmaschinen in Verbänden, Konsortien und den Wissenschaften*, ABI-Technik, Heft 2, 2004, Seiten 104–121.
58. F. H. Lutz, *A vertex-minimal non-shellable simplicial 3-ball with 9 vertices and 18 facets*, Electronic Geometry Models No. 2003.05.004 (2004), <http://www.eg-models.de/2003.05.004>.
59. F. H. Lutz, *Vertex-minimal not vertex-decomposable balls*, Electronic Geometry Models No. 2003.06.001 (2004), <http://www.eg-models.de/2003.06.001>.
60. F. H. Lutz, *Small examples of nonconstructible simplicial balls and spheres*, SIAM J. Discrete Math. **18** (2004), 103–109.
61. B. Lutz-Westphal, *Erlebnis Mathematik - Kombinatorische Optimierung im Unterricht*, Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung **2** (2004), 78–81.
62. B. Lutz-Westphal, *Dirigententraining für Mathematiker/innen. Ein „musikalisches“ Konzept für ein Vortragstraining*, Mitteilungen der Deutschen Mathematiker-Vereinigung **4** (2004), 282–284.
63. R. März, S. Burger, S. Golka, A. Forchel, C. Herrmann, C. Jamois, D. Michaelis und K. Wandel, *Planar High Index-Contrast Photonic Crystals for Telecom Applications*, in: *Photonic Crystals – Advances in Design, Fabrication and Characterization*, Eds: K. Busch et al., Wiley-VCH, (2004), 308–329.

64. R. März, S. Burger, H. Heidrich, A. Forchel, C. Herrmann, R. Wehrspohn, D. Michaelis und K. Wandel, *High-contrast planar photonic crystals*, In: *Nanophotonics for Communication*, Eds. M. Lipson et al., Proc. SPIE Vol. **5597** (2004), 68–81.
65. P. May, S. Barthel, I. Koch, *PTGL – a web-based database application for protein topologies*, Bioinformatics, 24.06.2004.
66. P. May, T. Steinke, M. Meyer, *THESEUS: A Parallel Threading Core*, Procs. 12th Internat. Conf. on Intelligent Systems for Mol. Bio. (ISMB) and 3rd European Conf. on Comp. Bio. (ECCB), Glasgow, August 2004, p. 199.
67. A. Maye, J. Rybak, U. Nowak, and B. Grünewald: *Realistic modeling of dendritic integration in the PE1-neuron*. FENS Forum Abstracts (2), A043.17 (2004)
68. A. Maye and M. Werning: *Temporal Binding of Non-Uniform Objects*. Neurocomputing 58–60, pp. 941–948 (2004)
69. A. Maye and M. Werning: *Implementing the (De-)Composition of Concepts: Oscillatory Networks, Coherency Chains and Hierarchical Binding*. In: S.D. Levy and R. Gayler, (Eds.), *Compositional Connectionism in Cognitive Science*. Menlo Park: AAAI Press: pp. 76-81 (2004)
70. N. Megow, M. Uetz und T. Vredeveld, *Stochastic online scheduling on parallel machines*, In *Proceedings of the 2nd Workshop on Approximation and Online Algorithms (WAOA 2004)*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3351, Springer, 2005, 167–180.
71. E. Michalsky, A. Goede, R. Preissner, P. May, T. Steinke, *A distributed pipeline for structure prediction*, CASP6 Methods Abstracts, 6th Meeting on the Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction, Gaeta (Italien), Dezember 2004, pp. 112–114.
72. E. Nkenke, S. Zachow, M. Benz, T. Maier, K. Veit, M. Kramer, St. Benz, G. Häusler, F. W. Neukam, and M. Lell. Fusion of computed tomography data and optical 3D images of the dentition for streak artefact correction in the simulation of orthognathic surgery. *Journal of Dento-maxillofacial Radiology*, 33(4):226–232, 2004.
73. S. Orlowski und R. Wessäly, *The Effect of Hop Limits on Optimal Cost in Survivable Network Design*, Proceedings of 7th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, Florida, USA, auch als Report 04-23, ZIB, 2004.
74. S. Orlowski und R. Wessäly, *An Integer Programming Model for Multi-Layer Network Design*, Proceedings of Optimization 2004, auch als Report 04-49, ZIB, 2004.
75. S. Prohaska, M. Dreher, M. W. Dewhirst, A. Chilkoti, A. R. Pries, M. Westerhoff, and A. J. M. Cornelissen, *3-D reconstruction of tumor vascular networks*, *J Vasc Res* **41** (2004), 463.
76. S. Prohaska, A. Hutanu, R. Kähler, and H-C. Hege, *Interactive exploration of large remote micro-CT scans*, Proc. IEEE Visualization '04 (Austin, Texas), 2004, pp. 345–352.
77. A. Reinefeld, F. Schintke, *Grid Services - Web Services zur Nutzung verteilter Ressourcen*, Informatik Spektrum, Springer-Verlag, April 2004, pp. 129–135.
78. A. Reinefeld, F. Schintke, *Dienste und Standards für das Grid Computing*, In: J. von Knop, W. Haferkamp (Hrsg.), 18. DFN Arbeitstagung über Kommunikationsnet-

- ze, Düsseldorf, Lecture Notes in Informatics, Series of the German Informatics Society (GI), 2004, vol. P-55, pp. 293–304.
79. A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt, *Scalable and Self-Optimizing Data Grids*, In: Yuen Chung Kwong (ed.), Annual Review of Scalable Computing, vol. 6, Singapore University Press, 2004, Chapter 2, pp. 30–60.
 80. T. Röblitz, F. Schintke, J. Wendler, *Elastic Grid Reservations with User-Defined Optimization Policies*, Proceedings of the 2nd Workshop on Adaptive Grid Middleware, In conjunction with PACT 2004, Antibes Juan-les-Pins, Frankreich, September 2004.
 81. T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld, *Resource Reservations with Fuzzy Requests*, Concurrency and Computation: Practice and Experience, John Wiley & Sons Ltd., zur Veröffentlichung angenommen.
 82. T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld et al., *Autonomic Management of Large Clusters and their Integration into the Grid*, Journal of Grid Computing, zur Veröffentlichung angenommen.
 83. K. Rother, H. Müller, S. Trissl, I. Koch, T. Steinke, R. Preissner, C. Frömmel, U. Leser, *Columba, Multidimensional Data Integration of Protein Annotations*, LNCS 2994:156, 2004.
 84. G. Schierholz, H. Stüben, *Optimizing the Hybrid Monte Carlo Algorithm on the Hitachi SR8000*, in: S. Wagner, W. Hanke, A. Bode, F. Durst (Hrsg.), High Performance Computing in Science and Engineering, Munich 2004, Springer Verlag, pp. 385–393.
 85. F. Schmidt, *Pole condition: A new approach to solve scattering problems*, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach, Report 11/2004, 2004, pp. 615–616.
 86. T. Schütt, A. Merzky, A. Hutanu, F. Schintke, *Remote Partial File Access Using Compact Pattern Descriptions*, IEEE/ACM Intl. Symp. on Cluster Computing and the Grid (CCGrid2004), IEEE Computer Society, April 2004.
 87. Wolfram Sperber und R. Roggenbuck, *Knowledge Transfer between Mathematics and Industry via the Web: the Math&Industry Initiative*, Proceedings: New Developments in Electronic Publishing of Mathematics, Satellite Conference of the Fourth European Congress, 2004, Stockholm, Schweden
 88. M. C. Steinbach, *Robust Process Control by Dynamic Stochastic Programming*, PAMM, 4(1):11–14, 2004.
 89. A. Sternbeck, E.-M. Ilgenfritz, W. Kerler, M. Müller-Preussker, H. Stüben, *The Aoki phase for $N_f = 2$ Wilson fermions revisited*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 129&130 (2004) pp. 853–855.
 90. W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, G.N. Duda, *Can Skin Markers Determine the Kinematics of Underlying Bones?* 50th Annual Meeting of the Orthopedic Society, San Francisco 2004, Orthopaedic research society, Transactions Vol. 29.
 91. H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege and H.-P. Seidel, *Stream Line and Path Line Oriented Topology for 2D Time-Dependent Vector Fields*, Proc. IEEE Visualization 2004, Austin, U.S.A., pp. 321–328, 2004.
 92. H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege and H.-P. Seidel: *Grid-Independent Detection of Closed Stream Lines in 2D Vector Fields*, Proc. Vision, Modeling and Visualization 2004, Stanford, U.S.A., pp. 421–428, 2004.

93. T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege, H.P. Seidel, *Boundary Switch Connectors for Topological Visualization of Complex 3D Vector Fields*, Proc. Joint Eurographics - IEEE TCVG Symposium on Visualization (VisSym '04), pp. 183–192, 2004.
94. T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege and H.-P. Seidel, *Topological Construction and Visualization of Higher Order 3D Vector Fields*, Computer Graphics Forum 23(3), pp. 469–478, 2004.
95. M. Weiser, A. Schiela, *Function space interior point methods for PDE constrained optimization*, PAMM 4 (2004), 43–46.
96. J. Wendler, F. Schintke, *Grid-Enabled Computational Fluid Dynamics using Flow-Grid*, Cracow Grid Workshop '03 Proceedings, Academic Computer Centre CYFRO-NET AGH, pp. 59–66, Februar 2004.
97. R. Wessály, C. Gruber, S. Orlowski, A. Zymolka und A. Koster, *Demand-wise Shared Protection revisited: A new model for survivable network design*, Proceedings International Network Optimization Conference (INOC 2005).
98. A. Westermarck, S. Zachow, and B. Eppley. 3D osteotomy planning in maxillofacial surgery, including soft tissue prediction. *Journal of Craniofacial Surgery*, 16(1):100–104, 2005.
99. L. Xiao, X. Zhang, A. Andrzejak, S. Chen, *Building a Large and Efficient Hybrid Peer-to-Peer Internet Caching System*, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, Vol. 16, Issue 6, pp. 754–769, Juni 2004.
100. S. Zachow, Th. Hierl, B. Erdmann, *Über die Qualität einer 3D Weichgewebeprädiktion in der Gesichtschirurgie: Ein quantitativer Vergleich mit postoperativen CT-Daten, Bildverarbeitung für die Medizin*, Berlin, (2004), 75–79.
101. S. Zachow, Th. Hierl, and B. Erdmann. Predictability of tissue changes after osteotomy planning in maxillofacial surgery: A comparison with postoperative results. In H. U. Lemke, et al., editors, *Computer Assisted Radiology and Surgery*, Elsevier Science B.V., S. 648–653, 2004.
102. S. Zachow, Th. Hierl, B. Erdmann, *A quantitative evaluation of 3D soft tissue prediction in maxillofacial surgery planning*, Proc. 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboter-assistierte Chirurgie e.V., München (2004).
103. S. Zachow, Th. Hierl, and B. Erdmann. A quantitative evaluation of 3d soft tissue prediction in maxillofacial surgery planning. In *Proc. 3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboter-assistierte Chirurgie (CD, www.curac.org/curac04/prog_curac.htm)*, 2004.
104. S. Zachow, H.-C. Hege, and P. Deuffhard. Computergestützte Operationsplanung in der Gesichtschirurgie. In *Proc. VDE Kongress – Innovationen für Menschen*, Fachtagsungsberichte DGBMT - GMM - GMA, Band 2, S. 53–58, 2004.

5.4 Monographien

1. P. Deuffhard, *Newton Methods for Nonlinear Problems: Affine Invariance and Adaptive Algorithms*. Springer Series in Computational Mathematics, SCM 35, Springer-Verlag, 2004, ISBN 3-540-21099-7.

2. M. Grötschel (Hrsg.), *The Sharpest Cut: The Impact of Manfred Padberg and His Work*, Series on Optimization 4, MPS-SIAM, 2004, ISBN 0-89871-552-0.

5.5 Dissertationen

Freie Universität Berlin

Malte Westerhoff (Abt. Visualisierung)

Efficient Visualization and Reconstruction of 3D Geometric Neuro-Biological Confocal Microscope Scans

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

Technische Universität Berlin

Thorsten Koch (Abt. Optimierung)

Rapid Mathematical Programming

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

5.6 Examensarbeiten

Freie Universität Berlin

Christian Ehrlich (Abt. Computer Science Research)

Generic consensus calculation from sequence analysing methods

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

Johannes Hettling (Abt. Computer Science Research)

Ein automatischer Vergleich zwischen der Protein Topology Graph Library und SCOP

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

Jonas Maaskola (Abt. Computer Science Research)

Neural networks to improve protein structure prediction with threading

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

Maximillian Weiss (Abt. Computer Science Research)

Eine Datenstruktur zur Erstellung eines X-Full-Alignment-Tree

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

Humboldt-Universität zu Berlin

Timm Baumeister (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Modellierung der freien Solvatisierungsenthalpie zum Protein Ligand Scoring

Betreuer: Frank Cordes, Reinhart Heinrich (ZIB / HU Berlin)

Andreas May (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

Rigid Body Docking for Screening of Pharmaceutical Databases

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)

Jörg Meltzer (Abt. Computer Science Research)

Vergleich von Co-Reservierungs-Algorithmen in Grid-Umgebungen

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Simon Rieche (Abt. Computer Science Research)

Lastbalancierung in Peer-to-Peer-Systemen

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Thomas Wenckebach (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Volumetrische Registrierung zur medizinischen Bildanalyse

Betreuer: Beate Meffert, Hans Lamecker, H.-C. Hege (HU Berlin / ZIB)

Jochen Witte (Abt. Computer Science Research)

Implementierung einer NFS-Schnittstelle im Kontext eines Grid-Datenmanagement-Systems

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

Lund University

Jon Adolfson, Johan Helgesson (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Generation of Smooth Non-Manifold Surfaces from Segmented Image Data

Betreuer: L. Ohlsson, D. Stalling (Lund University / ZIB)

Technische Universität Berlin

Matthias Barz (Abt. Optimierung)

Verteilte Algorithmen zur dynamischen Konfiguration optischer Netze

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Inna Dischke (Abt. Optimierung)

Disposition von Einsatzfahrzeugen: Startheuristiken, Branching-Regeln und Rundungstechniken

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Klaus Hildebrandt (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Discrete Shape Operator and Feature Preserving Surface Smoothing

Betreuer: Konrad Polthier, Ulrich Pinkall (ZIB / TU Berlin)

Scott Holzhütter (Abt. Optimierung)

Die Berechnung minimaler biochemischer Reaktionsnetzwerke mit Hilfe ganzzahliger Optimierung

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Armin Kubrak (Abt. Optimierung)

UMTS-Verkehr: Lastvorhersage und Mobilität

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Eike Preuß (Abt. Wissenschaftliche Visualisierung)

Hodge-Helmholtz Decomposition of Discrete Vector Fields

Betreuer: Konrad Polthier, Ulrich Pinkall (ZIB / TU Berlin)

Normen Rochau (Abt. Optimierung)

Planung interferenzbeschränkter zellulärer Funknetze mittels Set-Covering und -Packing

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Stephan Westphal (Abt. Optimierung)

Lower Bounds and Quality Guarantees for Online-Dispatching

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

Berufsakademie Berlin

Irina Sander (Abt. IT Services)

Systemübergreifende Analyse des Implementierungsstandes von Zugriffskontrollen auf Dateiebene (ACL) gemäß Standard POSIX.1e und Entwicklung eines Nutzungskonzeptes

Betreuer: Wolfgang Pyszkalski (ZIB)

Software

6.1 Numerische Algorithmen

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/Numerik/numsoft/CodeLib/>

<http://www.zib.de/Software/>

Ansprechpartner: Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

JCMsolve

JCMsolve ist ein umfangreiches Finite-Element Programm zur Berechnung elektromagnetischer Streu- und Eigenwertprobleme. Es werden folgende Anwendungsklassen abgedeckt:

1. Streulösungen im Frequenz-Bereich
 - Phasenmasken für die Photolithographie / EUV
 - Wellen-optische Schaltkreisimulation
 - Faser-Chip Kopplung
 - Transmission und Reflexion von Microlinsen, Microspiegel und anderen Hindernissen in der Optik und Mikrowellentechnik
2. Meta-Materialien und Nano-Optik
3. Geführte / Leaky Mode Berechnung
 - Optische Fasern
 - Integriert Optische Wellenleiter
 - Plasmon-Wellenleiter
 - Mikrowellenleiter, Koaxialkabel mit Verlust
4. Optische-/Mikrowellen- Resonatoren
5. Blochmoden zur Bandlückenberechnung in photonischen Kristallen.

JCMsolve wird kommerziell durch die JCMwave GmbH, Putzbrunn, vertrieben (<http://www.jcmwave.com>).

Ansprechpartner: Lin Zschiedrich (zschiedrich@zib.de),
Frank Schmidt (frank.schmidt@zib.de)

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 von Template-Techniken wird dabei eine hohe Flexibilität in der Anwendung ermöglicht.

VTL ist frei erhältlich (<http://www.zib.de/weiser/vtl>).

Ansprechpartner: Martin Weiser (weiser@zib.de)

6.2 Visualisierung

Amira

Die derzeit aktuelle Version AMIRA 3.1.1 wurde im Juli 2004 released. AMIRA ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Gemetrie-Rekonstruktion und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkern kann um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für spezifische 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 wird von Mercury Computer Systems kommerziell angeboten. Zur Zeit werden die Betriebssysteme

- Windows 98/ME/NT4/2000/XP (empfohlen Windows 2000/XP)
- Linux (RedHat 8.0 mit glibc-2.3.2.so oder höher)
- Linux Itanium 64 bit (RedHat AW 2.1)
- Linux AMD 64 (SuSE 9.0 oder kompatibel)
- HP-UX 11.0, 32/64-Bit-Code
- SGI Irix 6.5.x, 32/64-Bit-Code
- SUN Solaris 8 oder 9 (SunOS 5.8 or 5.9), 32/64-Bit-Code

unterstützt. Eine Version für Max OSX wird im Frühjahr 2005 verfügbar sein.

Zusätzlich 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. Zum Betrieb von Multisegment- und Mehrwand-Displaysystemen gibt es die auf PC-Clustern lauffähige Variante, genannt AMIRAVR.CLUSTER. Sie wird u.a. im 3-Wand-Stereoprojektionssystem ('Portal') des MATHEON verwendet.

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

Ansprechpartner: Detlev Stalling (stalling@zib.de).

JavaView

JAVAVIEW ist eine Software zur Visualisierung und geometrischen Verarbeitung von digitalen 3D Geometrien. Die Anwendungen erstrecken sich über:

- Einsatz in mathematischer Forschung und Lehre
- Prototypimplementierungen für industrielle Anwendungen
- Multimedia Publikationen, e-books, e-learning
- Visualisierungs-Plugin für Computeralgebra Systeme.

Der Einsatz von JAVAVIEW in Prototypimplementierungen für industrielle Anwendungen findet derzeit im Rahmen der Kooperation mit der Tebis AG (München) und der mental images GmbH (Berlin) statt. Die Web-Integration von JAVAVIEW bietet die Möglichkeit der Darstellung und des interaktiven Bearbeitens von Geometrien in beliebigen HTML-Dokumenten im Internet. Das offene API von JAVAVIEW erlaubt die Integration als Visualisierungs-Plugin mit prominenten Computeralgebra Systemen wie Maple, Mathematica und MuPad. JAVAVIEW war als "Maple Powertool" von Maplesoft verfügbar, und wird seit 2005 von SciFace als Viewer für die Linux-Version von MuPad eingesetzt. JAVAVIEW-basierte mathematische Web-Services gehören zu den Referenzbeispielen von webMathematica. Die Entwicklung von einigen JAVAVIEW Modulen wird von Wolfram Research und MuPad/SciFace unterstützt.

Aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.javaview.de>.

Ansprechpartner: Konrad Polthier (polthier@zib.de).

6.3 Optimierung

CS-OPT

CS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur Pairingbildung im Luftverkehr (crew-scheduling). Derzeit ist die Bildung von Pairings für Piloten unter Beachtung von Base Constraints für mittelgroße Szenarien möglich. Projektziel ist die simultane Planung von Pairings ganzer Flugzeugbesatzungen für große und komplexe Instanzen.

Es ist geplant, CS-OPT in das kommerzielle Planungssystem NetLine/Crew unseres Auftraggebers und Kooperationspartners Lufthansa Systems Berlin GmbH zu integrieren.

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer (borndoerfer@zib.de), Andreas Löbel (loebel@zib.de), Thomas Schlechte (schlechte@zib.de), Steffen Weider (weider@zib.de)

IS-OPT

IS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur integrierten Umlauf- und Dienstplanung im öffentlichen Personennahverkehr. Es erlaubt die simultane Planung von Fahrzeugumläufen und Fahrdiensten für regionale und städtische Szenarien. Dies erspart Planungsarbeit und setzt zusätzliche Optimierungspotenziale gegenüber einer herkömmlichen sequentiellen Planung frei.

IS-OPT ist in das kommerzielle Planungssystem MICROBUS 2 der IVU Traffic Technologies AG (Berlin) integriert, eine Integration in das Tool DIVA der Mentz Datenverarbeitung

GmbH (München) ist vorgesehen. Das Tool wurde erfolgreich bei der Regensburger Verkehrsverbund GmbH und bei verschiedenen Gesellschaften der DB Stadtverkehr GmbH getestet. IS-OPT wurde im BMBF-Förderprogramm „Neue mathematische Verfahren in Industrie und Dienstleistungen“ (FKZ 03-GR7ZI1-4) entwickelt.

Ansprechpartner: Ralf Borndörfer (borndoerfer@zib.de), Andreas Löbel (loebel@zib.de), Steffen Weider (weider@zib.de)

SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplex-Verfahrens. Es bietet sowohl primale wie duale Lösungsroutinen und ist als C++ Klassenbibliothek implementiert.

SoPlex kann als Unteroutine in anderen Programmen, aber auch selbständig verwendet werden und Probleme im MPS- und LP-Format einlesen.

Der Code wurde von Roland Wunderling am ZIB als Teil seiner Dissertation *Parallele 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)

LP-Basisverifizierer perPlex

Mit perPlex lassen sich Zulässigkeit, Optimalität und Ganzzahligkeit von LP-Lösungen verifizieren. Zu einem linearen Program im MPS-Format und einer Basis berechnet perPlex die primalen und dualen Variablen mit rationaler Arithmetik und bestimmt, ob die Basis tatsächlich zulässig und optimal ist. Die Ganzzahligkeit von ganzzahligen Variablen kann ebenfalls überprüft werden. Der exakte Wert der Zielfunktion und der Variablen wird ausgegeben.

Mit Hilfe von perPlex ist es gelungen, für alle Instanzen der Netlib-LP-Sammlung <http://elib.zib.de/netlib/lp> die beweisbar optimalen Zielfunktionswerte zu bestimmen.

PerPlex ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/perplex>.

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

Modellierungssprache Zimpl

Zimpl ist eine Programmiersprache zur Formulierung von Problemen als lineare (LPs) oder gemischt-ganzzahlige Programme (MIPs). Das Ergebnis wird als MPS-Datei oder LP-Datei ausgegeben und kann dann von gängigen LP-Lösern wie z. B. SoPlex (siehe Abschnitt 6.3) und MIP-Lösern (siehe Projekt *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*) verarbeitet werden.

Das lineare Programm

$$\begin{array}{ll} \min & 2x_1 + 3x_2 + 1.5x_3 \\ \text{subject to} & \sum_{i=1}^3 x_i \leq 6 \\ & x_i \geq 0 \end{array}$$

lässt sich in Zimpl z.B. so formulieren:

```
set I      := { 1 to 3 };
param c[I] := <1> 2, <2> 3, <3> 1.5;
var  x[I]  >= 0;
minimize cost: sum <i> in I : c[i] * x[i];
subto   cons: sum <i> in I : x[i] <= 6;
```

Zimpl wurde wieder in mehreren Projekten und Vorlesungen erfolgreich eingesetzt. Das Programm wird weiterhin entsprechend den Anforderungen in den Projekten weiterentwickelt. Im Berichtszeitraum konnte durch eine Neuimplementierung der Mengenoperationen eine wesentliche Geschwindigkeitssteigerung erreicht werden. Des Weiteren wurden Funktionen in die Sprache eingeführt, die IP-Systeme erzeugen und damit eine deutliche Vereinfachung bestimmter Modellierungsaufgaben ermöglichen.

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

Ansprechpartner: Thorsten Koch (koch@zib.de)

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 hochwertig bei minimalen Kosten zu planen. In der Anwendung beim Betreiber konnten Kosteneinsparungspotentiale von 30 Prozent und mehr aufgezeigt werden. Wichtige Referenzen sind Betreiber wie der DFN-Verein, 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)

TOPCOM

TOPCOM ist eine Programmsammlung zur Berechnung von Triangulierungen von Punkt-konfigurationen und orientierten Matroiden. Der Implementierung liegt die Idee zugrunde, die wesentlichen kombinatorischen Eigenschaften einer Punkt-konfiguration als orientiertes Matroid zu speichern. Damit können alle nachfolgenden Berechnungen koordinatenfrei und damit ohne Rundungsfehler erfolgen.

TOPCOM kann ab Version 0.10.0 (2001) auch die Regularität von Triangulierungen prüfen. Hierzu wird das cddlib-Paket von Komei Fukuda mit exakter Arithmetik benutzt.

Ferner kann TOPCOM seit 2003 mögliche Höhenvektoren für reguläre Triangulierungen ausgeben; diese können z. B. vom Programmpaket CatS von Anders Nedergaard Jensen <http://www.soopadoopa.dk/anders/cats/cats.html> zur Berechnung des sogenannten State-Polytops der Punkt-konfiguration weiterverwendet werden.

Siehe <http://www.zib.de/rambau/TOPCOM> für ständig aktualisierte Informationen.

Ansprechpartner: Jörg Rambau (Joerg.Rambau@uni-bayreuth.de)

AMSEL

AMSEL (A Modelling and Simulation Environment Library) ist eine C-Bibliothek, die die Programmierung von diskreten ereignisbasierten Simulationsprogrammen unterstützt. AMSEL wurde ursprünglich von Norbert Ascheuer entwickelt und wird jetzt in einer von Jörg Rambau überarbeiteten Fassung vom ZIB unter der ZIB Academic Licence zur Verfügung gestellt.

Siehe

<http://www.zib.de/Optimization/Software/Amsel/>

für weitere Informationen.

Ansprechpartner: Jörg Rambau (Joerg.Rambau@uni-bayreuth.de)

Constraint-Integer-Programming-Framework SCIP

In der Gemischt-Ganzzahligen Programmierung (*mixed integer programming*, MIP) und der Constraint-Programmierung (CP) werden ähnliche Techniken verwendet, um eine gegebene Problem Instanz zu lösen: Man zerlegt das Problem sukzessive in kleinere Teilprobleme, bis diese auf einfache Weise zu lösen sind. Dadurch entsteht ein *Branch-and-Bound*-Baum, dessen Knoten den Teilproblemen entsprechen.

MIP und CP unterscheiden sich aber in der Art und Weise, wie die einzelnen Teilprobleme behandelt werden, bevor man sie weiter zerlegt. MIP basiert auf dem Lösen der LP-Relaxierung, wodurch eine duale Schranke für das jeweilige Teilproblem abgeleitet werden kann. Die LP-Relaxierung kann zusätzlich durch *Schnittebenen* verstärkt werden. CP hingegen verwendet *Domain Propagation*, um aus den derzeitigen Wertebereichen der Variablen weitere Einschränkungen für die Wertebereiche abzuleiten. In CP steht keine starke duale Schranke wie die der LP-Relaxierung zu Verfügung, dafür ist man aber nicht nur auf lineare Nebenbedingungen beschränkt.

Das Softwarepaket SCIP (*solving constraint integer programs*) wurde entwickelt, um MIP- und CP-Techniken zu kombinieren. Ziel ist es, sowohl von den flexiblen Modellierungsmöglichkeiten des CP als auch von den effizienten, auf die spezielle Struktur der linearen Nebenbedingungen abgestimmten Lösungstechniken des MIP zu profitieren. SCIP kann als *Branch-Cut-and-Price*-Bibliothek verwendet werden und unterstützt zusätzlich das Einbinden von *Constraints* beliebigen Typs. Der Benutzer stellt die Semantik der zusätzlich benötigten Constraints zu Verfügung, indem er Zulässigkeitstests, Schnittebenen-Generatoren und Domain-Propagatoren implementiert. Außerdem können weitere Komponenten wie z. B. Primalheuristiken, Branchingregeln, zusätzliche Relaxierungen oder Separierer eingebunden werden.

In der derzeitigen Version 0.78 enthält SCIP bereits eine Vielzahl von Komponenten, die es erlaubt, Gemischt-Ganzzahlige Programme zu lösen.

SCIP ist online verfügbar unter <http://scip.zib.de/>.

Ansprechpartner: Tobias Achterberg (achterberg@zib.de)

6.4 Computeralgebra

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 April 2004 wurde die Version 3.8 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Die Distribution durch das ZIB begann im 3. Quartal 2004. Zusätzlich wurden vom ZIB Vertriebslizenzen vergeben an Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russland), Queen Mary and Westfield College (London, Großbritannien), Technische Universität Prag (Tschechische Republik) und Academia Sinica (Beijing, VR China) sowie Software-Händler in Japan, Korea und Polen.

An vielen Modulen wurden im Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der aktuellen REDUCE Version 3.8. In Zusammenarbeit mit den Kollegen in Passau wurde das User Interface überarbeitet. Siehe <http://www.zib.de/Symbolik/reduce/> für weitere Informationen.

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)
REACTEQN	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Modus (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)

Ansprechpartner: Winfried Neun (neun@zib.de)

6.5 Computer Science

Abstraction Layer

Die Ausführung von Programmen auf Clustern von PCs wird durch Batch-Systeme gesteuert. Der Abstraction Layer ermöglicht die Erweiterung der Funktionalität von Batch-Systemen. Ein Dämon nimmt Anfragen für das Abfragen des Zustandes des Batch-Systems und für die Kontrolle der Jobs entgegen, adaptiert sie und leitet sie an das Batch-System weiter. Der Dämon bietet eine Schnittstelle zum virtuellen Ab- und Anschalten von Rechenknoten, um einzelne Knoten im Cluster für Wartungszeiträume aus dem Betrieb herauslösen zu können.

Der Abstraction Layer unterstützt die Batch-Systeme OpenPBS und LSF. Weitere Informationen über den Abstraction Layer enthält die WWW-Seite <http://www.zib.de/csr/Software/AbstractionLayer/>.

Ansprechpartner: Thomas Röblitz (roebnitz@zib.de)

dmSCP - Sicherer und schneller Dateitransfer über das Internet

Im Zusammenhang mit Sicherheitsproblemen im Internet wird die Nutzung klassischer Dateitransfertools (wie `ftp`) zunehmend erschwert. Das mit der Secure Shell (`ssh`) gekoppelte `scp` bzw. `sftp` ist wegen der Verschlüsselung der Nutzdaten für große Datenmengen ungeeignet. Eine Kompromisslösung ist das ebenfalls auf `ssh` aufsetzende im ZIB entwickelte Produkt `dmSCP`. Hier geschieht die Sitzungssteuerung und das Übertragen der Metadaten verschlüsselt und die Nutzdaten werden unverschlüsselt übertragen. Eine Reihe von Maßnahmen verhindert das unbemerkte Verändern der Nutzdaten innerhalb des Netzes. Zusätzlich besitzt `dmSCP` einige für die Datenmigration nützliche Eigenschaften, wie z.B. Datei-Fragmentierung und das Management voller Dateisysteme. Aufgrund von Optimierungen sowohl in der rechnerlokalen Ein- /Ausgabe als auch im Netz ist `dmSCP` bis zu zweimal schneller als `ftp`. `dmSCP` wird deutschlandweit vor allem im Hochleistungsbereich und an einigen wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA genutzt.

Im Jahr 2004 wurde eine völlig neu strukturierte neue Version `dmSCP2` erstellt, die u.a. den Datentransport mit mehreren parallelen Datenströmen unterstützt. Das liefert insbesondere bei Netzverbindungen mit hoher Bandbreite und hoher Latenz (über weite Entfernungen) eine Erhöhung der Bandbreite auf bis zu 400% gegenüber der alten Version. Tests haben ergeben, daß die mit dem Netz-Testwerkzeug `iperf` gemessenen Durchsatzwerte durch `dmSCP2` erreicht werden.

`dmSCP2` wird 2005 weiterentwickelt. Die aktuelle Fassung ist in einem Drittmittelprojekt des

ZIB bereits im Produktionseinsatz.

(siehe auch http://mss.zib.de/mss/dmscp_paper_20000220.ps und <http://mss.zib.de/mss/dmscp/README.dmscp2>). Aktuelle Informationen und die Quellen finden sich unter: <http://mss.zib.de/mss>.

Ansprechpartner: Manfred Stolle (stolle@zib.de)

GuiGen

GuiGen ist ein Editor für graphische Formulare, der als internes Format XML verwendet wird. Mit Hilfe einer Java Applikation kann ein Formular dem Nutzer zum Ausfüllen präsentiert werden. Syntaxchecks auf Basis von regulären Ausdrücken kontrollieren, ob die Formularfelder mit sinnvollem Inhalt gefüllt wurden. Das ausgefüllte Formular kann dann wieder mittels XML transferiert und mit Hilfe von sogenannten Templates ausgewertet werden. Im Rahmen des Unicore Projektes (<http://www.kfajuelich.de/zam/RD/coop/unicoreplus/>) wurde dieses System zum einfachen, transparenten Zugriff auf Hochleistungsrechner genutzt. Mit ihm ist es auf einfache Weise möglich, fachspezifische Benutzerschnittstellen für Standardpakete wie BLAST oder Fluent zu erstellen und Simulationen auf verschiedenen Rechnerarchitekturen und Konfigurationen auszuführen.

Weitere Informationen unter <http://www.zib.de/CSR/Software/index.en.html>

Ansprechpartner: Hinnerk Stüben (stueben@zib.de)

Information Provider

Die Information Provider ermitteln die Zustandsinformationen eines Batch-Systems und präsentieren diese in einem speziellen Format. Dieses Format, auch als Glue Schema bezeichnet, wird von Informationsdiensten genutzt, um Ressourcen in einheitlicher Art und Weise darzustellen. Die Informationsdienste werden im Grid-Computing abgefragt, um zu einer Job-Anfrage passende Ressourcen zu finden.

Die Information Provider unterstützen die Batch-Systeme OpenPBS, LSF und Condor. Eine ausführlichere Beschreibung der Information Provider enthält die WWW-Seite <http://www.zib.de/CSR/Software/InformationProvider/>.

Ansprechpartner: Thomas Röblitz (roebnitz@zib.de)

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 des-

sen 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 Report 00-33, ZIB, 2000 vor, aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.zib.de/schintke/ldasim/>.

Ansprechpartner: Florian Schintke (schintke@zib.de)

nsync - Synchronisation von verteilten Verzeichnisstrukturen

`nsync` ist ein Tool zur Synchronisation von Datei-Verzeichnissen in verteilten Systemen. Es wurde insbesondere für das Management verteilter Daten für e-Science-Anwendungen (enhanced science) entwickelt. Im Grid Computing ist es notwendig, viele Tausend oder gar Millionen von Dateien, die in unterschiedlichen Rechenzentren verteilt gespeichert sind, regelmäßig zu synchronisieren. Auch in Cluster-Systemen drängt sich mit zunehmender Knotenanzahl der Einsatz von `nsync` auf.

Das Verfahren arbeitet ohne zentrale Instanz; die Synchronisation wird vollkommen verteilt und nebenläufig ausgeführt. Vor der eigentlichen Synchronisation werden Konflikte zwischen den Kopien erkannt und ein Ablaufplan erstellt. Der Ablaufplan, der selbst wieder parallel berechnet wird, berücksichtigt die Netzwerktopologie zwischen den Knoten und kann sich sowohl an unterschiedliche Topologien als auch an unterschiedliche Netzwerk-Bandbreiten anpassen.

`nsync` wurde in C++ geschrieben und unter der GNU General Public License veröffentlicht. Detaillierte Beschreibungen von `nsync` wurden auf wissenschaftlichen Konferenzen veröffentlicht und finden sich neben aktuellen Informationen unter <http://www.zib.de/schuett/nsync>.

Ansprechpartner: Thorsten Schütt (schuett@zib.de)

StorageBox

Persönliche Daten werden heute meist in Dateien auf Festplatte oder in speziellen Datenbanken von Programmen abgelegt. Die gemeinsame Verwaltung der so gespeicherten Daten ist somit meist unmöglich. Auch die immer wichtiger werdende Verteilung der Daten auf mehrere Geräte ist höchstens als Insellösung verfügbar. StorageBox ist eine persönliche Datenbank, die diese Probleme angeht. Sie ist darauf ausgelegt, persönliche Daten auf allen Geräten des Benutzers zu verwalten und konsistent halten zu können. Änderungen, die auf einem Gerät gemacht wurden, werden bei Gelegenheit auch über Dritte an alle anderen Geräte weitergegeben. StorageBox benutzt keinen speziellen Datenspeicher, sondern setzt direkt auf das Dateisystem auf, und kann somit ohne weitere Vorbereitungen die vorhandenen Dateien einbinden. Bei der Verwaltung der Daten ist der Benutzer nicht auf die klassische Ordnerstruktur festgelegt, sondern kann die Dateien mit beliebigen Attributen zur Kategorisierung versehen.

Weitere Informationen unter <http://www.storagebox.org/>

Ansprechpartner: Felix Hupfeld (hupfeld@zib.de)

6.6 Informationsdienste

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 des Math-Net zu benutzen. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste SIGMA (Gesamtindex), Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software betreut.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de), Winfried Neun (neun@zib.de), Wolfram Sperber (sperber@zib.de)

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.

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 elektronische Kommunikationsplattform für Optimierer, besteht seit 1993 und ist mittlerweile vollständig auf die so genannte LAMP-Technologie umgestellt.

Der ICM'98-Server informiert weiterhin über den *International Congress of Mathematicians* (<http://elib.zib.de/ICM98/>), der im Jahre 1998 in Berlin stattfand. Obwohl die Konferenz beendet ist, soll dieser Server zu Demonstrations- und Dokumentationszwecken weiterhin zugänglich bleiben. Zur langfristigen Archivierung existiert bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung (GWDG) ein Spiegel (<http://webdoc.gwdg.de/ICM98/>) des ICM'98-Servers.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

Server der International Mathematical Union (IMU)

Das ZIB betreut technisch und inhaltlich den Web-Server der *International Mathematical Union* (<http://www.mathunion.org/>). 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)*. Das Erscheinungsbild ist bewusst im Stile der Math-Net-Seite gehalten.

Die im letzten Jahr aufgebauten neuen Dienste *IMU-Net* und *EWDM* sind von der Community positiv angenommen worden. *IMU-Net* ist der elektronische Rundbrief der IMU. Er dient der weltweiten Verbreitung von Empfehlungen und Entscheidungen der IMU. Den Rundbrief haben über 4000 Mathematiker abonniert. Das *Electronic World Directory of Mathematicians (EWDM)* ist die elektronische Version des World Directory of Mathematicians (WDM), dessen weiterer Betrieb aus Kostengründen vom Executive Committee der IMU eingestellt

wurde. Zur Zeit haben sich fast 900 Personen in die Datenbank eingetragen.

Ansprechpartner: Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

6.7 KOBV-Dienste

Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale

KOBV-Portal – Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg

Unter der WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> stellt die KOBV-Zentrale seit 22. Dezember 2003 das KOBV-Portal bereit. Es ist das regionale Portal der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken und wurde im Rahmen eines Projektes in den Jahren 2001–2003 am ZIB konzipiert und aufgebaut. Das KOBV-Portal bietet in seiner ersten Ausbauphase einen Überblick über die in den regionalen Bibliotheken lizenzierten elektronischen Ressourcen (Datenbanken, Online-Kataloge, Linksammlungen, u. a. Kollektionen). Über den Open-Linking-Dienst SFX sind verschiedene Dienste abrufbar, unter anderem Online-Fernleihe, Dokumentlieferung, der Zugriff auf freie Volltexte und auf die Inhalte von circa 1.000 frei zugänglichen elektronischen Zeitschriften. Personalisierte Dienste erlauben die anonyme Selbstregistrierung, das Anlegen persönlicher Suchlisten sowie das Speichern von Suchanfragen und -ergebnissen für die spätere Wiederverwendung. Mit dem KOBV-Portal haben die Nutzer – quasi mit einem Mausklick – am Arbeitsplatz oder am heimischen PC rund um die Uhr den Zugang zu einem breiten Spektrum an Bibliotheksinformationen und -diensten. In das KOBV-Portal sind die KOBV-Suchmaschine und der Verbundkatalog Film integriert. Der Internet-Service wird ständig ausgebaut, indem die lizenzierten Ressourcen weiterer Bibliotheken sowie frei im Internet verfügbare Ressourcen integriert werden.

Ansprechpartner: Andres Imhof (imhof@zib.de), Lavinia Hodoroaba (hodoroaba@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Markus Malo (malo@zib.de)

KOBV-Suchmaschine

Unter der WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> wird seit dem 05. November 1999 die KOBV-Suchmaschine des Kooperativen Bibliotheksverbundes Berlin-Brandenburg (KOBV) bereitgestellt, die im Rahmen des KOBV-Projektes am ZIB entwickelt wurde. Am 12. 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. Softwaretechnisch bildet die KOBV-Suchmaschine die Basis für die KOBV-Portalsoftware und ist seit Dezember 2003 integrativer Bestandteil des KOBV-Portals. Die KOBV-Suchmaschine ist der virtuelle Verbundkatalog der Berliner und Brandenburgischen Bibliotheken, in dem die Nutzer unter einer gemeinsamen Oberfläche gleichzeitig in vielen regionalen Online-Katalogen recherchieren können: in allen Universitäts- und Fachhochschulbibliotheken, in der Staatsbibliothek zu Berlin, in vielen Spezialbibliotheken und in allen öffentlichen Bibliotheken. Über die Region hinaus können sie zudem in allen deutschen Bibliotheksverbänden sowie in großen internationalen Bibliotheken und -verbänden recherchieren. Die KOBV-Suchmaschine wird ständig weiter ausgebaut und

neue Bibliotheken werden in den Internet-Dienst eingebunden.

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)

Verbundkatalog Film

Über die WWW-Adresse <http://digibib.kobv.de/> kann auch auf den Verbundkatalog Film zugegriffen werden. Die KOBV-Zentrale hat den virtuellen, fachbezogenen Verbundkatalog Film gemeinsam mit dem Arbeitskreis Filmbibliotheken realisiert und stellt den Dienst seit 03. August 2003 bereit. Er bietet die parallele Suche nach Filmen (DVD/Videos) und Filmliteratur. Ende 2004 nehmen 13 Filmbibliotheken und Mediatheken aus ganz Deutschland am Hosting-Service der KOBV-Zentrale teil. Mit einem absuchbaren Bestand von rund 200.000 Filmen und 400.000 Bänden Filmliteratur ist der Verbundkatalog Film **das** Rechercheinstrument für Filme und Filmliteratur in deutschen Bibliotheken.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Monika Lill (lill@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 bietet den Nutzern ein modernes, rund um die Uhr zugängliches Rechercheinstrument. Unter **einer** Internetadresse sind aktuelle Informationen zu 850 regionalen Bibliotheken abrufbar. Vielfältige Suchmöglichkeiten unterstützen den Nutzer bei seiner Suche, wie eine anklickbare Karte, die Suche nach Stichwörtern aus dem Namen und eine fachliche Suche nach Bibliotheken mit bestimmten Fächerschwerpunkten. In 2004 hat die KOBV-Zentrale eine erweiterte Version in Betrieb genommen, die in Eigenentwicklung um eine Web-Katalogisierungsschnittstelle und eine Kommunikationsschnittstelle zur Bibliotheksdatei der Zeitschriftendatenbank (ZDB) ergänzt wurde. Erlaubt die Web-Katalogisierungsschnittstelle den Bibliotheken die einfache Pflege ihrer Bibliotheksdaten über das Internet, so kann mit Hilfe der Kommunikationsschnittstelle künftig Doppelarbeit vermieden werden: Jede Änderung im Bibliothekenführer wird automatisch an die Bibliotheksdatei weitergegeben. Auf diese Weise braucht eine Bibliothek ihre Bibliotheksdaten nur noch an einer Stelle, im KOBV-Bibliothekenführer, zu pflegen.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

Online-Fernleihe

Die Online-Fernleihe, die Automatisierung der Fernleihe in den Bibliotheken und die Umstellung auf einen Internet-Dienst für Endnutzer, wird im Rahmen eines Projektes in der KOBV-Zentrale realisiert. Die KOBV-Zentrale betreibt dazu den Zentralen Fernleihserver (ZFL-Server), der seit September 2003 im Routinebetrieb genutzt wird. Sukzessive geben die wissenschaftlichen Bibliotheken seit 2004 die Fernleihe für ihre Endnutzer frei. Während die KOBV-interne Fernleihe in 2004 flächendeckend realisiert ist, befindet sich die Komponente „verbundübergreifende Fernleihe“ noch im Aufbau. Für den Verbund der öffentlichen Bibliotheken im Land Brandenburg hat die KOBV-Zentrale ein Verfahren mit einem separaten Fernleihkreis entwickelt. Auf diese Weise können auch kleine, nicht-fernleihberechtigte

Bibliotheken die fortschrittliche Technik der Online-Fernleihe nutzen.

Ansprechpartner: Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de), Raluca Radu (radu@zib.de)

KOBV-Konsortialportal

Seit Anfang 2004 bietet die KOBV-Zentrale für die Bibliotheken den Dienst „KOBV-Konsortialportal“ an, der die Einrichtung sowie technische Pflege und den Betrieb lokaler Portale umfasst. Hier agiert die KOBV-Zentrale als Application Service Provider (ASP) für die Software MetaLib/SFX. Der Dienst erlaubt den beteiligten Bibliotheken, ihren Nutzern ohne großen lokalen Aufwand ein auf die lokalen Bedürfnisse zugeschnittenes Portal mit individueller Oberfläche, eigenen Ressourcen und Open-Linking-Diensten anzubieten. Im November 2004 ist die Universitätsbibliothek der HU Berlin im Rahmen des KOBV-Konsortialportals mit drei lokalen Portalen in Produktion gegangen: UB-Portal, Clio (Fachportal für die Geschichtswissenschaft) und Evifa (Virtuelle Fachbibliothek Ethnologie). Die Universitätsbibliothek der FU Berlin hat im Oktober 2004 mit ihren Open-Linking-Diensten den Produktionsbetrieb aufgenommen; das lokale Portal läuft im Testbetrieb.

Ansprechpartner: Lavinia Hodoroaba (hodoroaba@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

OPUS- und Archivierungsdienste

Seit Ende 2004 baut die KOBV-Zentrale einen neuen Dienst für die Bibliotheken auf: die Einrichtung sowie technische Pflege und den Betrieb lokaler Dokumentenserver. Die KOBV-Zentrale ist Application Service Provider (ASP) für die Publikationsplattform OPUS, die auf dem zentralen Server der KOBV-Zentrale installiert ist. Mit der Dienstleistung stellt die KOBV-Zentrale den Bibliotheken eine Software mit integrierten Autoren- und Bearbeitungsworkflows zum elektronischen Publizieren der lokal produzierten Dokumente zur Verfügung. Die Bibliotheken legen ihre elektronischen Dokumente auf dem KOBV-Server ab, wo sie regelmäßig gesichert und archiviert werden. Für die Bibliotheken, die den Dienst in Anspruch nehmen, bietet die KOBV-Zentrale als zusätzlichen Service den lokalen, regionalen und überregionalen Nachweis an. Auf diese Weise steht den Bibliotheken ein Mittel zur Verfügung, um ihre lokalen Publikationen der regionalen und überregionalen Wissenschafts-Community zur Verfügung zu stellen.

Ansprechpartner: Lavinia Hodoroaba (hodoroaba@zib.de), Monika Kuberek (kuberek@zib.de), Stefan Lohrum (lohrum@zib.de)

KOBV-Index

Über die KOBV-Suchmaschine <http://digibib.kobv.de/> kann auch auf den KOBV-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 den Index eingespielt. Inzwischen baut die KOBV-Zentrale ihn kontinuierlich aus und entwickelt ihn weiter mit dem Ziel, dass die KOBV-Bibliotheken ihn in stärkerem Maße als bisher als

Datenbasis für die Fremddatenübernahme nutzen können. 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)

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, T und Neuerscheinungsdienst), die Reihen „Books All“ und „Music“ der Library of Congress (LOC) ab 1968, den Gesamtbestand des Verbundkataloges maschinenlesbarer Katalogdaten deutscher Bibliotheken (Retro-VK) und die Titeldaten der Zeitschriftendatenbank. Darüber hinaus enthält er die drei deutschen Normdateien: Gemeinsame Körperschaftsdatei (GKD), Personennamendatei (PND), Schlagwortnormdatei (SWD). Die Daten werden – mit Ausnahme derer des 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), Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

Z39.50-Agentur für Online-Fremddatenübernahme

Seit 2003 hat die KOBV-Zentrale das Fremddatenangebot durch Realisierung des Zugriffes auf Kataloge im Internet stark erweitert. Die KOBV-Bibliotheken können nun die Online-Kataloge der anderen KOBV-Bibliotheken, die Verbundkataloge der deutschen Bibliotheksverbünde und Kataloge von Bibliotheken und -verbänden weltweit als Fremddatenquellen nutzen. Die KOBV-Zentrale agiert dabei als Z39.50-Agentur, indem sie den Zugriff zwischen den KOBV-Bibliotheken und den Fremddatenanbietern koordiniert.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

Sequentiell verteilte Suche

Die Sequentiell verteilte Suche wurde von der KOBV-Zentrale als Werkzeug für die Remote-Fremddatenübernahme über das Internet bereits während des KOBV-Projektes konzipiert und im Juni 2003 in Betrieb genommen. Sie ermöglicht Bibliotheken, die einen Z39.50-Client haben, per Knopfdruck die Übernahme strukturierter Datensätze aus einer entfernt liegenden Datenbank in das eigene Bibliothekssystem (Copy Cataloguing). Darüber hinaus kann jede Bibliothek für das Absuchen der Fremddatenbanken eigene Profile definieren und sich damit – je nach Bedarf – spezifische virtuelle Fremddatenpools im Internet zusammenstellen. Wie ZACK II ist die Sequentiell verteilte Suche damit ein Werkzeug zur Personalisierung der Fremddatenübernahme: Jede Bibliothek kann ihren eigenen, spezifischen „virtuellen Ver-

bund“ zur schnellen und qualitativ hochwertigen Fremddatenübernahme aufbauen. Neben frei zugänglichen Datenbanken sind in die Sequentiell verteilte Suche auch die vom KOBV lizenzierten Datenbanken des Fremd- und Normdatenservers eingebunden. Aus diesem Grund ist die Sequentiell verteilte Suche nur für KOBV-Mitglieder zugänglich.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

ZACK II

Das KOBV-interne Gateway ZACK II, ebenfalls ein Werkzeug für die Remote-Fremddatenübernahme über das Internet, ist insbesondere für Bibliotheken gedacht, die keinen Z39.50-Client haben. Das im Rahmen einer Diplomarbeit während des KOBV-Projektes am ZIB entwickelte WWW-Z39.50-Gateway ZACK ermöglicht einen verteilten Zugriff 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 Cataloguing). Im Auftrag der KOBV-Zentrale sind 2003 verschiedene Funktionserweiterungen programmiert worden, wie z.B. Warenkorb, Profilerstellung, kontextsensitive Hilfe, ISBD-Anzeige, Download von Bandformaten.

ZACK II wird seit Anfang 2004 von den Bibliotheken routinemäßig genutzt. Neben frei zugänglichen Online-Datenbanken sind in ZACK II auch die vom KOBV lizenzierten Datenbanken des Fremd- und Normdatenservers eingebunden. Aus diesem Grund ist das KOBV-interne Gateway ZACK II nur für KOBV-Mitglieder zugänglich.

Ansprechpartner: Hildegard Franck (franck@zib.de), Monika Lill (lill@zib.de), Beate Rusch (rusch@zib.de)

Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

Tobias Achterberg

29.01.2004 *Constraint Integer Programming*
Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken

15.06.2004 *Constraint Integer Programming*
Workshop SCIP, TU Darmstadt, Darmstadt

16.06.2004 *Implementieren mit SCIP*
Workshop SCIP, TU Darmstadt, Darmstadt

Artur Andrzejak

Mai/Juni 2004 *Modelling System Behaviour by Abstract State Machines*
SELF-STAR: International Workshop on Self-* Properties in Complex Information Systems, University of Bologna, Bertinoro, Italien

01.-05.11.2004 *Modeling and Predicting Demand of Applications in Clusters*
Dagstuhl Seminar „Future Generation Grids“

Daniel Baum

02.03.2004 *Strukturvergleich von Molekülen*
Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik

03.03.2004 *Einführung in Amira und AmiraMol*
Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik (zusammen mit Johannes Schmidt-Ehrenberg)

12.5.2004 *Konformationsanalyse - Strukturvergleich kleiner Moleküle unter Berücksichtigung metastabiler Konformationen*
Ringvorlesung der Informatik, Mathematik und Bioinformatik der FU Berlin

19.5.2004 *Strukturvergleich kleiner Moleküle unter Berücksichtigung metastabiler Konformationen*
Arbeitsgruppe Stefan Hougardy, DFG-Forschungszentrum, Projekt A5, HU Berlin

Timm Baumeister

02.03.2004 *Methoden des molekularen Dockings*
Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik

Werner Bengler

- 14.1.2004** *Numerische Relativitätstheorie im AEI*
Idesk-Präsentation für die Urania
- 19.1.2004** *Tensor Splats*
VDA2004, San José, Kalifornien, USA
- 6.2.2004** *The ART Project*
University of Colorado, USA
- 9.2.2004** *The ART Project*
Louisiana State University, USA
- 17.2.2004** *Numerische Relativitätstheorie im AEI*
Idesk-Präsentation für Deutsche Welle TV
- 28.2.2004** *The Fiber Bundle HDF5 File Format*
Innsbruck Visualization Workshop, Österreich
- 4.3.2004** *The technique of Tensor Splats*
Innsbruck Visualization Workshop
- 31.3.2004** *Tensorfeld Visualisierung in der Medizin*
Treffen des GI Arbeitskreises für Medizinische Visualisierung am ZIB
- 4.11.2004** *Tackling the Riddles of Gravity*
University of Davis, California, USA

Andreas Bley

- 22.07.2004** *Unique Shortest Path Systems*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 21.09.2004** *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*
Workshop TKN, ZIB, Berlin

Ralf Borndörfer

- 08.01.2004** *Optimierung im ÖPNV*
Workshop mit den Dresdener Verkehrsbetrieben, Dresdener Verkehrsbetriebe, Dresden
- 19.04.2004** *Vehicle and Duty Scheduling in Public Transit*
Workshop mit IVU Traffic Technologies Italia Srl, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 27.04.2004** *Stand und Zukunft von Optimierungstools im ÖPNV*
Workshop mit ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, ViP, Potsdam
- 29.04.2004** *Optimierung im ÖPNV*
Workshop „Kostenoptimierung im öffentlichen Verkehr“, IVU Traffic Technologies AG, Wiesbaden
- 10.05.2004** *Optimierungsverfahren im ÖPNV*
Workshop mit Lufthansa Systems Berlin, LSB, Berlin
- 07.06.2004** *Optimierung mit MICROBUS: Stand der Technik*
Workshop mit DB Stadtverkehr, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

- 08.06.2004** *Optimierungstools im ÖPNV: Fazit und Ausblick*
Workshop mit DB Stadtverkehr, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 09.06.2004** *Mathematische Dienstplanoptimierung*
„Verkehrslogistiksysteme des Personenverkehrs“, TFH Wildau
- 22.06.2004** *An Optimization Approach to Rail Track Auctioning*
Dagstuhl Seminar „Algorithmic Methods for Railway Optimization“, Schloss Dagstuhl
- 12.07.2004** *Mathematical Vehicle and Duty Optimization*
Workshop bei der Azienda Trasporti Milanese S.p.A., Mailand, Italien
- 03.09.2004** *A Bundle Method for Integrated Multi-Depot Vehicle and Crew Scheduling in Public Transit*
Symposium über Operations Research 2004, Universität Tilburg, Niederlande
- 08.09.2004** *A New Approach on Sophisticated Pairing Optimization*
Netline Forum 2004, Lufthansa Systems Berlin GmbH, Potsdam
- 22.09.2004** *Betriebsleitung und Störungsmanagement im Öffentlichen Verkehr*
MATHEON Workshop „Stochastische Aspekte kombinatorischer Netzplanung“, DFG-Forschungszentrum Matheon, TU Berlin

Manfred Brandt

- 16.09.2004** *On the Two-Class M/M/1 System under Preemptive Resume and Impatience of the Prioritized Customers*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung 2004, Heidelberg
- 28.10.2004** *A Sample Path Relation for the Sojourn Times in G/G/1 – PS Systems and its Applications*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

Sven Burger

- 23.01.2004** *Phase Dynamics of Bose-Einstein condensates – From Dark Solitons to the Josephson Effect*
Institut für theoretische Physik, Freie Universität Berlin
- 03.09.2004** *Efficient Finite Element Methods for the Design of Microoptical Components*
10th Microoptics Conference, Jena
- 09.09.2004** *Adaptive FEM Solver for the Computation of Electromagnetic Eigenmodes in 3D Photonic Crystal Structures*
Scientific Computing in Electrical Engineering – SCEE, Capo d’Orlando, Italien
- 11.11.2004** *Selbstadaptive Simulationen von Strukturen aus Photonischen Kristallen*
BMBF-Verbundprojekt „Planare photonische Kristalle in Materialsystemen mit hohem Brechzahlkontrast für die Telekommunikation“ – Statusseminar, Jena
- 13.11.2004** *Computational Photonics - Applications to Photonic Crystals*
DFG-Forschungszentrum Funktionelle Nanostrukturen, Universität Karlsruhe
- 30.11.2004** *Computational Photonics - Applications to Photonic Crystals*
Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin

09.12.2004 *Finite-element simulation of parametric processes and radiation losses in photonic crystals*

Kolloquium des DFG Schwerpunktprogramms 'Photonische Kristalle', Bad Honnef

Hubert Busch

03.03.2005 *Das HLRN-System - Stand der Realisierung der Einsystem-Eigenschaft der verteilten Systems Berlin - Hannover*

Arbeitskreis Supercomputing im ZKI, Stuttgart

12.05.2005 *BRAIN - The Regional Network in Berlin*

Kolloquium im Albert-Einstein-Institut der MPG, Potsdam

Frank Cordes

21.10.2004 *Conformation Dynamics, metastability analysis and virtual screening*

Zentrum für Bioinformatik, Hamburg, Seminar

19.11.2004 *Virtual screening*

Schering AG, Berlin, Seminar

Wolfgang Dalitz

17.03.2004 *Der IMU-Server*

10. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, Darmstadt

26.06.2004 *The IMU Website and Math-Net*

Satellite Conference to the European Congress of Mathematics (ECM) 2004 Stockholm, Schweden

Peter Deufflhard

15.01.2004 *3D Operation Planning and Biomechanical Modelling in Computer Assisted Facial Surgery*

Korean-German Bilateral Symposium on Scientific Computing, BBAW (Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften) & KAST (Korean Academy of Science and Technology, ZIB)

23.01.2004 *3D Operation Planning in Computer Assisted Surgery*

Mathematisches Kolloquium, GRIS, Universität Tübingen

10.03.2004 *Supercomputing is more than Computing on Supercomputers*

Institut für Theoretische Chemie und Strahlentherapie, TU Wien, Österreich

27.04.2004 *Drug Design statt Designerdrogen: neue mathematische Methoden beim Entwurf von Medikamenten*

Mathematisches Kolloquium, Universität Augsburg

07.06.2004 *Robuste Perron Cluster-analyse beim Entwurf von Medikamenten*

Fakultätskolloquium Mathematik, Universität Stuttgart

- 14.06.2004** *The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Simulation of Facial Surgery*
Invited Talk, International Conference on “Modern Computational Methods in Applied Mathematics (MCM 2004)”, Bedlewo, Poland
- 07.07.2004** *Mathematical Optimization of the Cancer Therapy Hyperthermia*
Mathematisches Kolloquium, Milan Research Centre for Industrial and Applied Mathematics (MIRIAM), Milano, Italy
- 28.10.2004** *Painters, Murderers, Mathematicians*
Invited Talk, Mathematics and Culture in Europe, University of Bologna, Italy
- 23.11.2004** *From Molecular Dynamics to conformation Dynamics in Drug Design*
Keynote Vortrag, CLAMV (Computational Laboratory for Analysis, Modeling, and Visualization) Seminar, International University of Bremen (IUB)

Andreas Eisenblätter

- 07.04.2003** *UMTS Radio Network Planning*
IMA Workshop on Network Management and Design, Minneapolis, USA
- 18.05.2004** *Mathematische Optimierung für UMTS-Netze*
Kolloquium des Instituts für Nachrichtentechnik, TU Braunschweig
- 08.06.2004** *Tutorial: Contents and Structure of the Morans & Momentum Radio Network Planning and Simulation Scenarios*
COST 273, 10th MCM, Göteborg, Schweden
- 10.06.2004** *UMTS Radio Network Tuning*
COST 273, 10th MCM, Göteborg, Schweden
- 13.07.2004** *Planung und Optimierung von Funknetzen*
Im Rahmen der Vorlesung „Anwendungen der kombinatorischen Optimierung“, TU Berlin

Bodo Erdmann

- 16.11.2004** *Simulation of the Human Mandible*
Centre of Excellence for Biomedical Modelling and Diagnostics, Warschau, Polen
- 17.11.2004** *3D Planning and Simulation Environment for Cranio-Maxillofacial Surgery*
Centre of Excellence for Biomedical Modelling and Diagnostics, Warschau, Polen

Philipp Friese

- 11.02.2004** *Real-Time Control of Multi Server Transport Systems with Reoptimization Algorithms*
Eingeladener Vortrag bei der Arbeitsgruppe AG1 (Martin Skutella), Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken
- 28.05.2004** *Online-Control of Multi-Elevator Systems with Reoptimization Algorithms*
Doktorandenseminar des DFG-Graduiertenkollegs 621 (MAGSI), ZIB, Berlin
- 13.07.2004** *Kapazität vs. Intelligenz – Produktivität von Aufzugsystemen*
Vortrag bei der Arbeitsgruppe Seliger, Produktionstechnisches Zentrum Berlin (PTZ)

- 26.08.2004** *Kapazität vs. Intelligenz – Produktivität von Aufzugsystemen*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 14.09.2004** *Kapazität vs. Intelligenz – Produktivität von Aufzugsystemen*
Workshop des DFG-Graduiertenkollegs 621 (MAGSI), Schloss Blankensee
- 29.10.2004** *Kapazität vs. Steuerung – Leistungsbeurteilung von Aufzugsystemen*
Klausurtagung des DFG-Graduiertenkollegs 621 (MAGSI), TU Berlin

Tobias Gänzler

- 30.09.2004** *Numerical Methods for a Constrained Parameter Estimation Problem in Hyperthermia*
Universität Heidelberg

Hans-Florian Geerdes

- 27.01.2004** *Integer Programming Methods for UMTS Radio Network Planning*
COST273, 9th MCM, Athen, Griechenland
- 08.03.2004** *Planning the WCDMA Radio Interface with Mathematical Programming*
7th Informs Telecommunication Conference, Boca Raton, Florida, USA
- 10.05.2004** *UMTS Radio Network Design*
Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern
- 12.05.2004** *UMTS Radio Network Design*
TU Kaiserslautern, Oberseminar Optimierung, Kaiserslautern
- 08.06.2004** *Tutorial: Contents and Structure of the Morans & Momentum Radio Network Planning and Simulation Scenarios*
COST 273, 10th MCM, Göteborg, Schweden
- 18.06.2004** *UMTS Radio Network Design: A New Optimization Model*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 21.06.2004** *Planning the UMTS Radio Interface*
CGC-Kolloquium, TU Berlin
- 03.09.2004** *UMTS Radio Network Panning Based on Average Load*
OR2004, Tilburg, Niederlande
- 13.09.2004** *UMTS Radio Network Design: A New Optimization Model*
Doktorandenworkshop Graduiertenkolleg MAGSI, Blankensee
- 20.09.2004** *Status of MORANS R2.0*
COST 273, 11th MCM, Duisburg
- 22.09.2004** *Stochastic Problems in Radio Network Evaluation*
DFG-Forschungszentrum MATHEON, Workshop “Stochastische Aspekte Kombinatorischer Netzplanung”, TU Berlin

Martin Grötschel

- 13.01.2004** *Lineare Optimierung, Polyeder und semialgebraische Geometrie*
gemeinsames Kolloquium der TU und LMU München

- 04.03.2004** *High Quality Public Transportation: Mathematical, Social, Political, and Business Aspects*
Universität Tilburg, Tilburg, Niederlande
- 22.03.2004** *LP-Approaches to Cycles in Matroids*
Triangle Discrete Math and Optimization Day, Duke University, Durham, NC, USA
- 22.04.2004** *Graph Colouring and Frequency Assignment*
Merton College, Oxford University, Oxford, England
- 29.04.2004** *Mathematische Optimierung im ÖPNV*
Workshop „Kostenoptimierung im öffentlichen Verkehr“, Wiesbaden
- 29.04.2004** *Linear Programming: The Workhorse of Optimization*
Ringvorlesung des Graduiertenkollegs MAGSI in Zusammenarbeit mit dem DFG-Forschungszentrum MATHEON zum Thema: „Optimization in Engineering - Vision and Reality“, TU Berlin
- 03.06.2004** *Modellierung und Simulation und was Mathematiker darunter verstehen*
TU Berlin, Fakultät Architektur Umwelt Gesellschaft, Institut für Entwerfen, Baukonstruktion und Gebäudekunde, Berlin
- 15.06.2004** *Transportation and Integer Programming*
2004 SIAM Discrete Math Meeting, Nashville, Tennessee, USA
- 23.06.2004** *Research at the DFG Research Center MATHEON: An Overview*
Schering AG, Berlin
- 05.07.2004** *OR on OR*
20th European Conference on Operational Research (EURO 2004), July 4–7, 2004, Rhodos, Griechenland
- 13.07.2004** *Applied Math Research at the Berlin DFG Research Center*
ILOG, Paris, Frankreich
- 13.07.2004** *Optimization research and applications at ZIB*
ILOG, Paris, Frankreich
- 22.07.2004** *Optimizing Public Transport*
IX Encuentro de Matemáticas y sus Aplicaciones, Quito, Ekuador
- 23.07.2004** *The International Mathematical Union and its functions*
IX Encuentro de Matemáticas y sus Aplicaciones, Quito, Ekuador
- 23.07.2004** *What is going on in linear and integer programming?*
IX Encuentro de Matemáticas y sus Aplicaciones, Quito, Ekuador
- 27.08.2004** *Discrete optimization and telecommunication*
EuroScience Open Forum, Stockholm, Schweden
- 27.08.2004** *Channel Assignment and Graph Colouring*
Royal Institute of Technology (KTH), Stockholm, Schweden
- 01.09.2004** *50 Years of Combinatorial Optimization: Progress in Practice*
GOR/NGB Conference, Tilburg, Niederlande
- 06.10.2004** *Modelling, Simulation, and Optimization: Viewpoint of a Mathematician*
INFRATRAN Autumn School “Network Economics - Modeling and Regulating Transport and Energy Sectors in Europe”, TU Berlin

- 11.10.2004** *Das BMBF-Mathematikprogramm im Web*
Workshop „Math&Industry“, ZIB, Berlin
- 11.11.2004** *Mathematische Verfahren zur Bestimmung von Pareto-Mengen*
4. Workshop der BBAW-Studiengruppe „Strukturbildung und Innovation: Transdisziplinäre Aspekte, Analyse und Optimierung“, Berlin
- 07.12.2004** *Mathematische Optimierung im industriellen Einsatz*
Siemens AG, München

Tobias Harks

- 25.02.2004** *Internet Congestion Control*
Klausurtagung DFG-Graduiertenkolleg 621 (MAGSI)
- 23.03.2004** *Internet Congestion Control*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 27.05.2004** *Internet Congestion Control - Optimization Based Approach*
Congestion Control Group, TKN, TU Berlin
- 11.08.2004** *Utility Proportional Fairness - A Resource Allocation Problem*
Congestion Control Group, TKN, TU Berlin
- 14.09.2004** *Utility Proportional Fairness - A Resource Allocation Problem*
Workshop MAGSI, Blankensee
- 29.10.2004** *Utility Proportional Fair Resource Allocation*
Klausurtagung DFG-Graduiertenkolleg 621 (MAGSI)

Hans-Christian Hege

- 18.03.2004** *Datenanalyse numerische Extraktion von geometrischen und topologischen Merkmalen*
Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin
- 31.03.2004** *Medizinische Forschungsprojekte am ZIB*
Arbeitskreis Medizinische Visualisierung der Gesellschaft für Informatik (GI), ZIB, Berlin
- 18.04.2004** *Tensor Splats in Medicine and General Relativity*
Perspectives Workshop: Visualization and Image Processing of Tensor Fields, Dagstuhl
- 06.05.2004** *Parallele und Verteilte Visualisierung*
Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik, Universität Paderborn
- 14.05.2004** *Merkmalsextraktion zur visuell gestützten Analyse von Strömungsfeldern*
Institut für Maritime Systeme und Strömungstechnik, Universität Rostock
- 26.05.2004** *Moderne Visualisierung versteckte Zusammenhänge sichtbar machen*
TU Darmstadt, Mathematisches Kolloquium
- 21.-25.06.2004** *International Summer School on Geometry and Visualization*
5 day lecture series, Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis, Maubeuge, Frankreich

- 30.06.2004** *Creating 3D Geometrical Models from 3D Image Data*
Ringvorlesung der Informatik, Bioinformatik und Mathematik: Rechnen in der Wissenschaft, FU Berlin
- 03.07.2004** *3D-Visualisierung von wissenschaftlichen Daten: von Molekülen bis zu kosmischen Phänomenen*
DAAD Stipendiatentreffen in Berlin im Juli 2004, ZIB
- 18.10.2004** *Scientific Visualization: Potential Research Goals*
Center for Computation and Technology, Louisiana State University, Baton Rouge, LA, USA
- 12.11.2004** *Distributed Visualization and Analysis of Fluid Dynamics Data*
Invited Talk, AFI/TFI-2004 Fourth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration, Tohoku University, Sendai, Japan
- 15.11.2004** *Distributed Visualization and Data Analysis*
Graphics Day, Invited Talk, Kanazawa University, Japan
- 17.12.2004** *Scientific Visualization at ZIB*
Zentrum für Muskel- und Knochenforschung, Charité Campus Benjamin Franklin, Berlin

Klaus Hildebrandt

- 02.06.2004** *Prescribed Mean Curvature Flow*
Oberwolfach Seminar 2004: Discrete Differential Geometry
- 01.09.2004** *Anisotropic Filtering of Non-Linear Surface Features*
Eurographics 2004, Grenoble, France
- 16.09.2004** *Web-based Visualization and Integration with Computer Algebra*
Invited Talk at DMV Jahrestagung 2004, Heidelberg
- 26.09.2004** *Web-Based Visualization and Online Education*
Workshop as part of the DAAD exchange program "Stabilitätspakt Südosteuropa", University of Nis, Serbia
- 29.09.2004** *Web-Based Visualization and Online Education*
Workshop as part of the DAAD exchange program "Stabilitätspakt Südosteuropa", University of Sofia, Bulgaria

Benjamin Hiller

- 07.12.2004** *Probabilistic Competitive Analysis of an Elementary Dial-a-Ride Problem*
Workshop der DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin

Lavinia Hodoroaba

- 21.10.2004** *Kann eine Software beides sein – Fertigprodukt und Entwicklungsplattform? Ansichten zu MetaLib*
1. Tagung der deutschsprachigen MetaLib/SFX-Anwender, ZIB, Berlin
- 21.10.2004** *Besitzt MetaLib wirklich ein Enterprisemodell?*
1. Tagung der deutschsprachigen MetaLib/SFX-Anwender, ZIB, Berlin

Felix Hupfeld**12.05.2004** *StorageBox*

AEI Grid Day, MPI für Gravitationsphysik, Golm

25.-26.10.2004 *Introduction To Grids*

COST D23 Tutorial on Grid Computing, CSCS Manno, Schweiz

25.-26.10.2004 *Data Management in Grids*

COST D23 Tutorial on Grid Computing, CSCS Manno, Schweiz

Andres Imhof**03.03.2004** *Das KOBV-Informationportal, Elektronische Ressourcen in Berlin-Brandenburg: Nachweis und Parallele Suche*

Workshop „Campus Web, Portale für Forschung&Lehre“, München

22.09.2004 *Vorstellung des KOBV-Portals und des Metadata-Tools*

Sitzung der AG Regionales KOBV-Portal, ZIB, Berlin

Ralf Kähler**26.02.2004** *The 3D Visualization System Amira*

Numerical Relativity Mesh Refinement Meeting, Universität Innsbruck, Österreich

27.02.2004 *Visualization of Adaptive Mesh Refinement Data*

Numerical Relativity Mesh Refinement Meeting, Universität Innsbruck, Österreich

28.02.2004 *Remote Visualization in Grid Environments*

Numerical Relativity Mesh Refinement Meeting, Universität Innsbruck, Österreich

23.03.2004 *Gridbasierte Visualisierungen großer Datensätze*

DFN-Future-Talk, CeBIT 2004, Hannover

Bernd Kallies**19.11.2004** *Electronic Structure of Transition Metal Complexes*

Schering AG, Berlin

Thorsten Koch**29.01.2004** *UMTS Planung*

Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken

30.01.2004 *Volltextserver oder "Die Zukunft ist digital"*

Informationsmanagement online – Internetressourcen zu Ibero-Amerika für die Fachwissenschaft, Erste Fachtagung der Virtuellen Fachbibliothek Ibero-Amerika cibera, Staatsbibliothek Berlin

01.07.2004 *Heute, Morgen + Konflikte*

Workshop der Virtuellen Fachbibliothek Recht an der Staatsbibliothek zu Berlin

Arie M.C.A. Koster

- 10.01.2004** *Safe Separators for Treewidth*
Workshop on Algorithm Engineering and Experiments (ALENEX'04), New Orleans, USA
- 04.02.2004** *Minimum Converter Wavelength Assignment in All-Optical Networks*
The 8th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM 2004), Gent, Belgien
- 08.03.2004** *Design of Survivable Optical Networks by Demand-wise Shared Protection*
7th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA
- 13.05.2004** *Communicating on the same Wavelength - Discrete Optimization for Telecommunication Networks*
Universität Paderborn
- 14.06.2004** *Stable Multi-Sets: Theory and Computations*
SIAM Conference on Discrete Mathematics, Nashville, USA
- 02.09.2004** *Lower Bounds for Minimum Converter Wavelength Assignment*
Operations Research 2004, Tilburg, Niederlande
- 10.11.2004** *WDM Networks: Dimensioning, Routing, and Wavelength Assignment*
Lehrstuhl für Theoretische Informationstechnik, RWTH Aachen
- 07.12.2004** *Degree-based Treewidth Lower Bounds*
Learn Workshop DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin

Monika Kuberek

- 30.04.2004** *Der KOBV – Dienste für Nutzer und Bibliotheken auf einer innovativen Plattform*
Ständige Konferenz der FachbereichsleiterInnen im Verbund Öffentlicher Bibliotheken Berlins, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur, Berlin
- 15.06.2004** *Informationsinfrastruktur in Berlin und Brandenburg – Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)*
Verein Deutscher Bibliothekare – Regionalverband Berlin-Brandenburg, Berlin

Hans Lamecker

- 17.01.2004** *Visualization of the Variability of 3D Statistical Shape Models by Animation*
MMVR12 Konferenz, Newport Beach, Kalifornien, USA
- 31.03.2004** *Überblick über medizinische Projekte am ZIB*
Treffen des GI Arbeitskreises für Medizinische Visualisierung, ZIB
- 30.05.2004** *Modellbasierte Segmentierung der Leber*
Eingeladener Vortrag am MeVis, Bremen
- 21.06.2004** *Scientific visualization with Amira*
Int. Summer School on Geometry and Visualization, Maubeuge, Frankreich
- 30.06.2004** *Modellbasierte 3D Bildsegmentierung*
Ringvorlesung “Rechnen in der Wissenschaft” der FU Berlin, ZIB

12.12.2004 *Modellbasierte Segmentierung*
 Eingeladener Vortrag am CAB, TU Braunschweig

Joachim Lügger

- 09.01.2004** *Entwicklungsarbeiten im KOBV*
 Offene Informationsveranstaltung für das Kuratorium und den Hauptausschuss des KOBV, ZIB, Berlin
- 13.01.2004** *Nahtlose Navigation und Open Linking*
 Bayerische Staatsbibliothek, München
- 29.01.2004** *Volltextserver – Einführung und Beispiele*
 „Informationsmanagement online“, 1. cibera-Fachtagung, Ibero-Amerikanisches Institut, Berlin
- 23.04.2004** *Zusammenarbeit mit vascoda im Rahmen des Verteilten Dokumentenservers (VDS)*
 2. Leipziger Kongress für Information und Bibliothek, Sitzung der AG der Verbundsysteme, Leipzig
- 15.10.2004** *Die Bibliothek der Zukunft und der Beitrag des KOBV*
 Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg, Potsdam
- 09.11.2004** *Der KOBV und seine Angebote für Benutzer und Bibliotheken*
 Landesverband Brandenburg im Deutschen Bibliotheksverbund e. V., Stadt- und Landesbibliothek Potsdam, Potsdam

Frank Lutz

- 03.02.2004** *Graphenfärbungen und Sphärenbündel*
 Geometrie-Seminar, TU Dresden
- 14.06.2004** *The Geometry of Graph Colorings*
 European Graduate Program „Combinatorics, Geometry, and Computation“, TU Berlin
- 04.07.2004** *Hom Complexes and Graph Coloring Manifolds*
 „Geometry, Topology, and Combinatorics“, A Satellite Conference of the 4th European Congress of Mathematics, KTH Stockholm, Schweden
- 19.07.2004** *Graph Coloring Manifolds*
 „Algebraic Topological Methods in Computer Science, II“, London, Ontario, Kanada
- 27.07.2004** *Graph Coloring Manifolds*
 IAS/Park City Mathematics Institute (PCMI), Research Program „Geometric Combinatorics“, Park City, USA
- 24.08.2004** *Graph Coloring Manifolds*
 International Conference „Geometric Topology, Discrete Geometry and Set Theory“, Moskau, Russland
- 14.09.2004** *Zufällig realisierte Flächen*
 Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (Sektion Geometrie), Heidelberg

- 17.09.2004** *Graphenfärbungs-Mannigfaltigkeiten*
Jahrestagung der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (Sektion Topologie), Heidelberg
- 12.11.2004** *Random Realization of Surfaces*
Kolloquium über Kombinatorik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
- 08.12.2004** *Enumeration and Random Realization of Triangulated Surfaces*
Learn- & Workshop „Randomness, Geometry, and Counting“, TU Berlin

Brigitte Lutz-Westphal

- 13.02.2004** *Lebendiger Mathematikunterricht mit kombinatorischer Optimierung*
Universität Duisburg-Essen
- 02.03.2004** *Lebendiger Mathematikunterricht mit kombinatorischer Optimierung*
GDM-Jahrestagung, Augsburg
- 07.05.2004** *Kombinatorische Optimierung im Grundkurs*
Fachtagung „Bausteine für ein zeitgemäßes Grundkurskonzept“ (SINUS-Transfer), Soest
- 14.09.2004** *Kombinatorische Optimierung – Schüler/innen erforschen Mathematik*
DMV-Jahrestagung, Heidelberg
- 25.09.2004** *Diskrete Mathematik – Möglichkeiten, Wege und Beispiele für den Unterricht*
Länderkoordinatorentreffen von „Teachers Teaching with Technology“, Göttingen
- 12.11.2004** *Mathematik erleben – kombinatorische Optimierung im Unterricht*
ISTRON-Tagung, Birkenfeld (Nahe)
- 23.11.2004** *Kombinatorische Optimierung – Schüler/innen erforschen Mathematik*
Universität Freiburg

Patrick May

- 22.01.2004** *PTGL – Protein Topology Graph Library*
Graduiertenkolleg Bioinformatik, Universität Bielefeld
- 03.02.2004** *Protein Threading with Knowledge-Based Potentials*
Macromolecular Modelling Group, FU Berlin
- 02.06.2004** *Threading – Scoring functions and the problem of validation*
BCB Symposium
- 29./30.07.2004** *THESEUS – A Parallel Threading Core. SIG Structural Bioinformatics*
ISMB/ECCB, Glasgow, United Kingdom

Sebastian Orłowski

- 27.01.2004** *A Model for the Multi-layer Network Design Problem*
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 08.03.2004** *The Effect of Hop Limits on Optimal Cost in Network Design*
7th INFORMS Telecommunication Conference, Boca Raton, Florida, USA

- 8.03.2004** *Comparing Restoration Concepts: What's the impact on Optimal Network Cost?*
7th INFORMS Telecommunication Conference, Boca Raton, Florida, USA
- 27.07.2004** *An Integrated Planning Model for Multi-layer Network Design*
Konferenz Optimization 2004, Lissabon, Portugal

Philip Paar

- 20.06.2005** *Dogma 3D*
Symposium CinESCAPE Landscape at the Interface of Science and Art, Wien, Österreich (zusammen mit Jörg Rekitke)
- 22.06.2005** *Landschaftsvisualisierung*
TU Berlin, Landschaftsplanung - Methoden der Landschaftsanalyse und Bewertung II (Wirkungsprognosen und Umweltfolgenbewältigung) (zusammen mit Jörg Rekitke)
- 18.07.2005** *Lenn'e3D für Sanssouci*
Schloss Glienicke für die Abteilung Museumspädagogik der Stiftung Preußischer Schlösser und Gärten Berlin-Brandenburg
- 05.09.2005** *Lenn'e3D für Sanssouci*
Schloss Glienicke für die Abteilung Museumspädagogik der Stiftung Preußischer Schlösser und Gärten Berlin-Brandenburg
- 03.10.2005** *Lenn'e3D für Sanssouci*
Schloss Glienicke für die Abteilung Museumspädagogik der Stiftung Preußischer Schlösser und Gärten Berlin-Brandenburg
- 06.10.2005** *3D-Visualisierung als Bestandteil des interaktiven Landschaftsplans*
Tagung "Die Verwissenschaftlichung kultureller Qualität in der Landschaftsplanung und im Naturschutz", Internationale Naturschutzakademie Vilm
- 02.11.2005** *Lenn'e3D - ein System zur interaktiven Landschaftsplanung*
Workshop der GEOkomm-Fachgruppe 3D-Stadtmodelle / 3D-Landschaftsmodelle, Hasso-Plattner-Institut, Potsdam
- 19.11.2004** *Vegetationsmodellierung im Forschungsprojekt Lenn'e3D*
Gastvorlesung Interpretation ökologischer Karten, Technische Universität Berlin, Institut für Ökologie (zusammen mit Wieland Röhrich)

Christoph Petz

- 30.03.2004** *Validierung von Strömungssimulationen in kardiovaskulären Anwendungen*
BVM 2004, Berlin

Marc Pfetsch

- 05.01.2004** *Line Planning in Public Transport*
8th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 18.02.2004** *Optimizing Discrete Morse Functions*
SIGOPT Tagung 2004, Lutherstadt Wittenberg
- 01.04.2004** *Strategic Planning in Public Transport*
Zentrumstage DFG-Forschungszentrum MATHEON 2004, Berlin

- 27.04.2004** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, ViP, Potsdam
- 01.06.2004** *Computing Optimal Discrete Morse Functions*
Cologne-Twente Workshop 2004, Menaggio, Italien
- 12.07.2004** *Computing Optimal Discrete Morse functions*
32. BAT, TU Berlin
- 09.08.2004** *Models for Line Planning in Public Transport*
CASPT 2004, San Diego, USA
- 14.09.2004** *Optimizing Discrete Morse Functions*
DMV-Tagung, Heidelberg
- 22.09.2004** *Planung von Transport und Telekommunikationsnetzen mit variablen Bedarfsanforderungen*
MATHEON-Workshop „Stochastische Aspekte kombinatorischer Netzplanung“, TU Berlin
- 23.11.2004** *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr*
Seminarreihe Informationsverarbeitung und computergestützte Simulation, Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen, TU Braunschweig

Uwe Pöhle

- 12.10.2004** *Konzept und Prototyp der Softwareplattform des DFG-Forschungszentrums*
MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“
Workshop „Die Web-Präsentation des BMBF-Mathematikprogramms“, ZIB, Berlin

Konrad Polthier

- 17.03.2004** *Prescribed Mean Curvature Flow for Mesh Optimization*
Invited Talk at Workshop of EU Thematic Network MACSINET, FhG Darmstadt
- 01.04.2004** *Prescribed Mean Curvature Flow for Mesh Optimization*
Plenary Talk at EU-Workshop Effective Computational Geometry, INRIA, Paris, Frankreich
- 25.05.2004** *Geometry and Topology Issues in Mesh Compression*
Invited Talk at BIRS Workshop on Mathematical Foundations of Scientific Visualization, Computer Graphics, and Massive Data Exploration, Banff, Kanada
- 21.-25.06.2004** *Int. Summer School on Geometry and Visualization*
5 Day Lecture Series at Maubeuge, Frankreich
- 14.-18.09.2004** *Discrete Geometry for Computer Graphics*
Invited Lectures at Autumn school of Institute of Computer Science, Univ. Konstanz in St. Vigil, Österreich
- 23.09.2004** *Design of Functional Applets*
Invited Talk at DAAD Workshop, SANU Belgrad, Serbien
- 27.09.2004** *Multimedia Tools for Interactive Mathematics*
Invited Talk at Colloquium of Mathematics, TU Budapest, Ungarn

- 28.09.2004** *Discrete Differential Geometry and Computer Graphics*
Invited Talk at Oberseminar Geometrie, TU Budapest, Ungarn
- 20.11.2004** *Discrete Curvature Operators and Surface Optimization*
Plenary Talk at Conference on Integrable Systems, Geometry and Visualization, Kyushu University in Fukuoka, Japan
- 24.11.2004** *Video MESH*
Invited Video presentation at Faculty of Science, Kobe University, Japan
- 26.11.2004** *Discrete Curvature Operators and Surface Optimization*
Workshop on Geometry, Tokyo Metropolitan University, Japan
- 13.12.2004** *Efficient Optimization of Polyhedral Shapes*
Invited Talk at Colloquium of Computer Science, Univ. Bonn

Eike Preuss

- 15.12.2004** *Curve Optimization Under Spatial Constraints*
MATHEON Miniworkshop: Mathematical Topics in Surface Modelling, TU Berlin

Steffen Prohaska

- 25.05.2004** *Exploring High-Resolution Medical Image Data*
BIRS Workshop on Mathematical Foundations of Scientific Visualization, Computer Graphics, and Massive Data Exploration, Banff, Alberta, Kanada
- 14.10.2004** *Interactive Exploration of Large Remote Micro-CT Scans*
IEEE Visualization, Austin, Texas, USA
- 26.10.2004** *Interactive visual data analysis of terascale data: an achievable goal?*
Eingeladener Vortrag am Center for Computation & Technology (Louisiana State University), Louisiana, USA

Jörg Rambau

- 27.01.2004** *Kombinatorische Methoden in Geometrie, Topologie und Optimierung*
Zentrum Mathematik, TU München
- 02.02.2004** *Stability, Sensitivity, and Robustness in Combinatorial Online-Optimization*
C-Day, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Berlin
- 18.02.2004** *Fast Reoptimization Algorithms for Multi-Elevator Systems*
SIGOPT 2004, Wittenberg
- 02.06.2004** *Wo bleibt der Aufzug?*
Gastvortrag in der Vorlesung „Produktionslogistik“, Service des DFG-Forschungszentrums MATHEON, TFH Berlin
- 18.08.2004** *Where is the Elevator? Combinatorial Online Optimization in Practice*
Plenarvortrag bei der Latin American Conference on Combinatorics, Graphs and Applications 2004 (LACGA'04), University of Chile, Santiago, Chile
- 26.11.2004** *The Beautiful World of Regular Triangulations*
Seminaire En Recherche Operationnelle, EPFL Lausanne, Schweiz

Alexander Reinefeld

- 10.03.2004** *Grid Infrastructures and Beyond: Concepts for Next Generation Grids*
Global Grid Forum, Berlin
- 14.05.2004** *Grid-Computing mit Peer-to-Peer-Techniken*
Fuldaer Informatik Kolloquium 2004, FH Fulda
- 03.06.2004** *Dienste und Standards für das Grid Computing*
18. DFN-Arbeitstagung über Kommunikationsnetze, Düsseldorf
- 29.09.2004** *Zukünftige Dienste im D-Grid: Neue Anforderungen an die Rechenzentren?*
ZKI Herbsttagung, FH Heilbronn
- 30.09.2004** *Grid-Computing: Techniken, Standards, Perspektiven*
Deutsche Initiative für Netzwerkinformation e.V. (DINI), Jahrestagung 2004, Heilbronn
- 07.10.2004** *Chancen und Bedingungen: Was bedeutet e-Science für das wissenschaftliche Arbeiten?*
Thementag e-Science: „Wissenschaftsmanagement im virtuellen Labor - Managementlösungen gesucht“, Bonn
- 25.-26.10.2004** *The Web Services Resource Framework: From OGSA to WSRF*
COST D23 Tutorial on Grid Computing, CSCS Manno, Schweiz
- 01.-05.11.2004** *Autonomic Computing - A Prerequisite for Grid Computing*
Dagstuhl Seminar 04451 „Future Generation Grids“
- 01.12.2004** *The GRID: Internet der nächsten Generation als Beitrag zu Europas digitaler Zukunft*
Deutsche Gesellschaft für Auswärtige Politik, Berlin

Robert Roggenbuck

- 11.10.2004** *Der Ansatz und die Werkzeuge zur Erstellung der Web-Präsentationen der Projekte, Pläne für die Zukunft*
Workshop “Die Web-Präsentation des BMBF-Mathematikprogramms”, ZIB, Berlin
- 12.10.2004** *Das zentrale Portal und seine Informationsdienste*
Workshop “Die Web-Präsentation des BMBF-Mathematikprogramms”, ZIB, Berlin

Beate Rusch

- 10.09.2004** *The Metalib Enterprise Model: Experiences at KOBV*
2004 SFX/MetaLib User’s Group Meeting, 10.–11.09.2004, Porto, Portugal
- 22.10.2004** *Bericht von der internationalen SMUG-Tagung 2004 in Porto*
1. Tagung der deutschsprachigen MetaLib/SFX-Anwender, 21.–22. 10.2004, ZIB, Berlin
- 16.12.2004** *Fremddatenübernahme leicht gemacht: Arbeiten mit ZACK*
ZACK-Workshop für Einsteiger, ZIB, Berlin

Achim Schädle

06.02.2004 *Non-reflecting boundary conditions for time-dependent problems; numerical approximation.*

AG Analysis und Numerik, Universität Basel, Schweiz

Anton Schiela

11.10.2004 *Interior Point Methods in Function Space*

Seminar "Variational Inequalities", Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

Florian Schintke

29.-30.01.2004 *Data Management Technical Working Group*

IST-Concertation Meeting, Zypern

01.-05.11.2004 *The ZIB Distributed Data Management System*

Dagstuhl Seminar „Future Generation Grids“

Thomas Schlechte

06.10.2004 *Airline Crew Scheduling - Pairing Optimization*

Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

Frank Schmidt

22.02.2004 *Pole Condition – A New Approach to Solve Scattering Problems*

Oberwolfach

20.03.2004 *A New Approach to the Computation of Leaky Modes*

OWTNM 2004, Gent, Belgien

12.05.2004 *Finite Element Computation of Photonic Crystals*

Universität Halle

25.06.2004 *HelmPole and JCMharmony – FEM for Maxwell*

MP Infineon Dresden

29.08.2004 *Laplace-Domain-Methode – Ein neuer Zugang zur Lösung akustischer und optischer Streuprobleme*

Universität Saarbrücken

29.09.2004 *Effiziente Finite-Elemente-Methoden für Maskenlithographie*

MP Infineon Dresden

30.11.2004 *Computational Photonics: Finite Element Theory for Maxwell's Equations*

CFN Karlsruhe

Johannes Schmidt-Ehrenberg

03.03.2004 *Einführung in Amira und AmiraMol*

Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik (zusammen mit Daniel Baum)

12.5.2004 *Konformationsanalyse - Visualisierung metastabiler Konformationen*
Ringvorlesung der Informatik, Mathematik und Bioinformatik der FU Berlin

02.06.2004 *Visualizing Molecular Conformations*
BCB Symposium 2004, Berlin

Thorsten Schütt

12.05.2004 *Remote Partial File Access*
AEI Grid Day, Golm

Wolfram Sperber

17.03.2004 *Math&Industry – ein Portal für Projekte der angewandten Mathematik*
10. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, TU Darmstadt

13.05.2004 *Web-Präsentation von Projekten – die Erfahrungen von Math&Industry*
Präsentation im BMBF, Bonn

26.06.2004 *Knowledge Transfer between Mathematics and Industry: the Math&Industry Initiative*
Satellite Conference to the European Congress of Mathematics (ECM) 2004, Stockholm, Schweden

14.09.2004 *Wie findet man mathematische Software im Netz? Überlegungen zu Informationsdiensten für mathematische Software*
Minisymposium “Mathematik und Internet”, Jahrestagung der DMV/ÖMG 2004, Heidelberg

11.10.2004 *Strukturierung und Präsentation der Informationen der Projekte*
Workshop “Die Web-Präsentation des BMBF-Mathematikprogramms”, ZIB, Berlin

Regine Stein (mit Jürgen Gottschewski)

19.10.2004 *Erläuterungen und Kommentare zum CIDOC-CRM*
jährliche Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Berlin (http://www.museumsbund.de/fgdoku/dmbdoku_termine/dmbokt2004/beitraege/beitraege-2004.htm)

Marc Steinbach

22.03.2004 *Robust Process Control by Multistage Stochastic Programming*
GAMM-Jahrestagung 2004, Dresden

23.03.2004 *Large-Scale NLP in Operative Planning for Gas Networks*
GAMM-Jahrestagung 2004, Dresden

29.03.2004 *Minimum Cost Operation of Berlin's Drinking Water Network*
European Conference on Computational Optimization 2004, Dresden

03.06.2004 *Tank Level Control under Random Inflow by Stochastic Programming*
Workshop “Stock Level Optimization under Uncertainty”, BASF, Ludwigshafen

- 16.06.2004** *NLP Techniques for Operative Planning in Large Water Networks*
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin
- 25.06.2004** *Kostenminimale operative Planung im Berliner Trinkwassernetz*
Westfälische Hochschule Zwickau
- 09.09.2004** *On PDE Solution in Gas Networks*
First Indo-German Conference on PDE, Scientific Computing and Optimization in Applications, Trier
- 16.09.2004** *Addressing MINLP Issues in Dynamic Operation of Water Networks*
DMV-Jahrestagung, Heidelberg
- 27.09.2004** *Fast Robot Trajectory Planning*
Workshop “New directions of research for robotics in flexible manufacturing processes”, WIAS, Berlin
- 08.10.2004** *A Practical MINLP Approach for Dynamic Operation of Water Networks*
Workshop on Applied Optimization, Dresden
- 08.11.2004** *NLP Reformulation of MINLP under Nonlinear Network Dynamics*
Workshop on Integer Programming and Continuous Optimization, Chemnitz

Thomas Steinke

- 08.07.2004** *Parallel Computing in Life Science: Prospects and Pitfalls*
ZBH-LifeScience-Seminar, Zentrum für Bioinformatik, Universität Hamburg
- 20.09.2004** *GRIDCHEM – A Preproposal for a New COST Action*
In Zusammenarbeit mit Hans-Peter Lüthi (ETH ZÜRICH), OST Chemistry Technical Committee Meeting, Brüssel, Belgien
- 19.11.2004** *Threading Framework at ZIB*
Konsulententreffen, Schering AG
- 23.11.2004** *Threading Framework at ZIB/BCB*
BioTec-Seminar, BioTechnologisches-Zentrum, Technische Universität Dresden
- 18.12.2004** *Quantum Chemical Workflows in Grid Environments*
COST D23 WG6-Meeting, Universität Ferrara, Italien

Hinnerk Stüben

- 03.03.04** *Optimizing the Hybrid Monte Carlo Algorithm on the Hitachi SR8000*
Second Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop 2004, Leibniz-Rechenzentrum, München
- 01.09.04** *Mass Storage Capacity for Computational Hadron Physics*
I3HP Topical Workshop, St. Andrews

Dima Suliman

- 13.07.2004** *Finding and Analyzing Mathematical Formulae in MathML and OpenMath on the Web*
Konferenz CASC 2004, Euler Institut, St. Petersburg, Russland

20.09.2004 *Classifying Differential Equations on the Web*
Konferenz MKM 2004, Universität Bialystok (Bialowieza), Polen

Andreas Tuchscherer

08.01.2004 *Dynamic Configuration of Optical Telecommunication Networks*
Workshop „Combinatorics“, Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

31.03.2004 *Stability, Sensitivity, and Robustness in Combinatorial Online-Optimization*
DFG-Forschungszentrum Matheon, Zentrumstage 2004, TU Berlin

01.09.2004 *Dynamical Configuration of Transparent Optical Telecommunication Networks*
International Conference on Operations Research (OR 2004), Tilburg, Niederlande

Tjark Vredeveld

02.02.2004 *Modelling, analysis, and simulation of modular real-time systems*
C-Day des DFG-Forschungszentrums MATHEON

10.02.2004 *Topology matters: smoothed competitive ratio of metrical task systems*
Seminar DFG-Forschergruppe “Algorithmen, Struktur, Zufall”, Berlin

17.06.2004 *Optimization under Uncertainty*
Gastvortrag Universität Maastricht, Niederlande

21.06.2004 *Stochastic Online Scheduling*
Seminar DFG-Forschergruppe “Algorithmen, Struktur, Zufall”, Berlin

23.06.2004 *Combining Stochastic and Online Scheduling*
Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken

28.06.2004 *Stochastic Online Scheduling on Parallel Machines*
Technische Universität Kaiserslautern

03.09.2004 *Increasing the size of a neighborhood is not necessarily beneficial*
OR 2004, Tilburg, Niederlande

16.12.2004 *Models and Algorithms for Stochastic Online Scheduling*
Optimierungsworkshop, ZIB, Berlin

Max Wardetzky

01.06.2004 *Polyhedral Meshes and Convergence Properties*
Oberwolfach Seminar 2004: Discrete Differential Geometry

19.07.2004 *Matheon Visualization - Algorithms and Web based Software*
Visit of German Research Foundation, TU Berlin

27.09.2004 *Discrete Differential Geometry on Polyhedral Surfaces*
Workshop as part of the DAAD exchange program “Stabilitätspakt Südosteuropa”,
University of Nis, Serbia

29.09.2004 *Discrete Differential Geometry on Polyhedral Surfaces*
Workshop as part of the DAAD exchange program “Stabilitätspakt Südosteuropa”,
University of Sofia, Bulgaria

19.10.2004 *Topics in Applied Geometry: Surface Optimization and Mesh Compression*
Invited Talk at International University Bremen

Marcus Weber

11.06.2004 *Mathematik im Wirkstoffentwurf, Rent the Center MATHEON*
Schülervortrag und Unterrichtsbesuche in der Gesamtschule Rastede bei Oldenburg

19.08.2004 *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*
Algorithms for Macromolecular Modelling, AM3 Tagung University Leicester, United Kingdom

Steffen Weider

16.06.2004 *Abschlussworkshop des BMBF-Projektes "Integrierte Umlauf- und Dienstplanung"*, ZIB, Berlin

09.08.2004 *A Bundle Method for Integrated Multi Depot Vehicle and Duty Scheduling in Public Transit*
9th International Conference on Computer-Aided Scheduling of Public Transit, San Diego, USA

Tino Weinkauff

20.05.2004 *Boundary Switch Connectors for Topological Visualization of Complex 3D Vector Fields*
Joint Eurographics – IEEE TCVG Symposium on Visualization 2004, Konstanz

02.09.2004 *Topological Construction and Visualization of Higher Order 3D Vector Fields*
Eurographics 2004, Grenoble, Frankreich

Martin Weiser

07.01.2004 *Interior Point Methods for the Numerical Solution of Optimal Control Problems*
Universität Paderborn

22.03.2004 *Interior Point Methods in Function Space*
75. GAMM-Jahrestagung, Dresden, MS „PDE-constrained optimization“

27.05.2004 *Interior Point Methods in Function Space*
Humboldt-Universität, Berlin

27.07.2004 *Function space oriented interior point methods for optimal control problems*
Optimization 2004, MS „Optimal Control and Applications“ Lissabon, Portugal

01.09.2004 *Interior point methods in optimal control*
Potsdam Institut für Klimafolgenforschung

13.09.2004 *Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden*
DMV Jahrestagung 2004, Heidelberg

Andreas Wendleder**15.03.2004** *Einführung in das Lenn'e3D-System*

Entwicklungs- und Erprobungsvorhaben "Interaktiver Landschaftsplan Stadt Königslutter am Elm", Königslutter

17.-24.03.2004 *Die Realität ist nicht genug – 3D-Landschaften auf der CeBIT 2004*

CeBIT 2004, Hannover

17.08.2004 *Ein virtueller Spaziergang in einem verlorenen Garten*

Vernissage der Ausstellung "Preußisch Grün – Vom königlichen Hofgärtner zum Gartendenkmalpfleger", Schloss Glienicke, Berlin

Roland Wessäly**09.01.2004** *Optimizing Core and Access Telecommunication Networks*

5th Aussois Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

04.05.2004 *Kostenoptimierung mit Garantie: Konfiguration und Design von Transportnetzen*

5. ITG Fachtagung, Leipzig

16.06.2004 *Large-scale hierarchical networks: How to compute an optimal hierarchy*

Networks 2004, Wien, Österreich

08.09.2004 *Optimizing large-scale hierarchical networks*

SATNAC 2004, Stellenbosch, Südafrika

09.10.2004 *Hierarchical Infrastructure Planning in Telecommunication Networks*

INFRATRAN 2004, Berlin

Stefan Zachow**30.03.2004** *Über die Genauigkeit einer 3D Weichgewebepräädiktion in der MKG-Chirurgie: Ein quantitativer Vergleich mit postoperativen CT-Daten*

Bildverarbeitung für die Medizin (BVM), Berlin

31.03.2004 *Modellgenerierung, Planung und Weichgewebepräädiktion für die computer-gestützte MKG-Chirurgie*

Treffen des GI Arbeitskreises für Medizinische Visualisierung am ZIB

26.06.2004 *Predictability of tissue changes after osteotomy planning in maxillofacial surgery: A comparison with postoperative results*

8. Conference of the Int. Society for Computer Aided Surgery (ISCAS), Chicago, USA

30.06.2004 *Operationsplanung in der MKG-Chirurgie*

Ringvorlesung "Rechnen in der Wissenschaft" der FU Berlin

16.07.2004 *3D-Operationsplanung in der MKG-Chirurgie – Modellgenerierung, Planung, Weichgewebepräädiktion*

Freitagsskolloquium Computer-Grafik am Wilhelm Schickard Institut für Informatik, Graphisch-Interaktive Systeme (WSI/GRIS), Tübingen

19.09.2004 *Advances in 3D osteotomy planning with soft tissue prediction*

2. Int. Symposium on Computer Aided Surgery around the Head, Bern, Schweiz

09.10.2004 *Quantitative Bewertung der Simulationsgüte einer 3D Weichgewebepräädiktion für die Operationsplanung in der Gesichtschirurgie*
3. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboter-assistierte Chirurgie e.V., München

20.10.2004 *Computergestützte Operationsplanung in der Gesichtschirurgie*
VDE Kongress 2004 – Innovationen für Menschen, Fachtagung der DGBMT, Berlin

Lin Zschiedrich

16.02.2004 *Multilevel Methods for the Computation of Eigenmodes in 3D Photonic Crystal*
Seminar Photonische Kristalle, ZIB

22.03.2004 *Accurate 3D Photonic Band Gap Computation Based on \vec{k} -modified Whitney Elements and Fast Multilevel Methods*
OWTNM 2004, Poster Präsentation, Gent, Belgien

24.11.2004 *JCMFEM - A Modern Maxwell FEM-Solver*
Seminar bei J. Lang, Universität Darmstadt

Adrian Zymolka

10.03.2004 *Wavelength Assignment in Optical Networks with Minimum Number of Conversions*
7th INFORMS Telecommunications Conference, Boca Raton, USA

21.09.2004 *Optimization of Optical Networks*
Treffen mit der Arbeitsgruppe von Prof. Wolisz, ZIB, Berlin

7.2 Vorlesungen und Seminare

Artur Andrzejak: FU Berlin

WS 03/04 *Verteilte Datenstrukturen in Peer-to-Peer-Systemen* (Seminar), Mitveranstalter: A. Reinefeld (ZIB)

WS 04/05 *Data Mining and Prediction* (Seminar), Mitveranstalter: A. Reinefeld (ZIB)

WS 04/05 *Autonomic Computing* (Seminar), Mitveranstalter: A. Reinefeld (ZIB)

Wolfgang Baumann: TU Berlin

WS 03/04 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung), Mitveranstalter: H. Stüben (ZIB)

Ralf Borndörfer: TU Berlin

WS 04/05 *Spieltheorie und kombinatorische Auktionen* (Seminar)

Manfred Brandt: HU Berlin

SS 04 *Funktionentheorie II* (Vorlesung)

Frank Cordes: FU Berlin

WS 03/04 *Visualisierung, Modellierung, Dynamik und Simulation von Biomolekülen* (Softwarepraktikum, Mitveranstalter: T. Steinke, ZIB)

WS 03/04, SS 04 *Moleküle im Rechner* (Seminar, Mitveranstalter: Ch. Schütte und B. Schmidt, FU Berlin)

SS 04 *Der lange Weg zum Wirkstoff* (Seminar, Mitveranstalter: W. Huisinga, FU Berlin)

Peter Deuffhard: FU Berlin

WS 03/04 *Numerik der Optimalsteuerung* (Vorlesung mit Übungen)

SS 04 *Projektseminar Mathematische Modellierung und Simulation in Medizin und Biotechnologie* (Mitveranstalter: R. Hochmuth (U Potsdam / TU Bergakademie Freiberg))

WS 04/05 *Numerische Mathematik II: Numerik von Differentialgleichungen* (Vorlesung mit Übungen)

WS 03/04, SS 04, WS 04/05 *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 03/04, SS 04, WS 04/05 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden*
(Mitveranstalter: E. Bänsch (FUB/WIAS), R. Klein (FUB/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FUB), C. Schütte (FUB))

Martin Grötschel: TU Berlin

WS 03/04 *Lineare Optimierung (ADM II)* (Vorlesung)

WS 03/04 *Matchings, Flüsse und Verallgemeinerungen* (Blockseminar)

SS 04 *Gemischt-Ganzzahlige Optimierung: Theorie, Algorithmen und Fallstudien (ADM III)* (Vorlesung)

SS 04 *Graphenfärbung* (Blockseminar)

WS 04/05 *Spieltheorie und kombinatorische Auktionen* (Blockseminar)

Hans-Christian Hege: Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien

WS 03/04 *Scientific Visualization* (Blockkurs)

Hans-Christian Hege: Hochschule für Digitale Medienproduktion, Elstal

WS 04/05 *Wissenschaftliche Visualisierung* (Blockkurs)

Hans-Christian Hege: Université de Valenciennes, Maubeuge, Frankreich

WS 04/05 *Computer Graphics and Scientific Visualization* (Blockkurs)

Thorsten Koch: Berufsakademie Berlin

SS 04 *Mathematische Methoden der Informatik II* (Vorlesung)

WS 04/05 *Graphentheorie* (Vorlesung)

Arie M.C.A. Koster: TU Berlin

SS 04 *Mathematics for Engineers (GPE)* (Vorlesung mit Übungen)

Monika Kuberek: HU Berlin

WS 03/04 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar im Studiengang Wissenschaftliche Bibliothekarin/Wissenschaftlicher Bibliothekar des Postgradualen Fernstudiums am Institut für Bibliothekswissenschaft)

WS 04/05 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar im Studiengang Wissenschaftliche Bibliothekarin/Wissenschaftlicher Bibliothekar des Postgradualen Fernstudiums am Institut für Bibliothekswissenschaft)

Frank Lutz: TU Berlin

WS 03/04 *Lineare Optimierung (ADM II)* (Übung/Programmierbetreuung)

WS 03/04 *Matchings, Flüsse und Verallgemeinerungen* (Blockseminar)

SS 04 *Lineare Algebra für Ingenieure* (Vorlesung)

SS 04 *Graphenfärbung* (Blockseminar)

WS 04/05 *Schnellkurs Ingenieurmathematik (Analysis I und II und Lineare Algebra)* (Vorlesung)

WS 04/05 *Spieltheorie und kombinatorische Auktionen* (Seminar)

Marc Pfetsch: FU Berlin

WS 03/04 *Lineare Optimierung* (Vorlesung)

SS 04 *Grundlagen der Finanzmathematik* (Seminar)

Marc Pfetsch: TU Berlin

WS 04/05 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

Konrad Polthier: TU Berlin

WS 04/05 *Einführung in Scientific Visualization, gemeinsame Vorlesung von FU- und TU-Berlin* (Vorlesung)

WS 03/04 *Höhere Mathematik für Physiker* (Vorlesung)

Jörg Rambau: TU Berlin

WS 04/05 *Triangulierungen von Punktmengen und Polyedern* (Vorlesung)

Alexander Reinefeld: HU Berlin

WS 03/04 *Verteilte Datenstrukturen in Peer-to-Peer-Systemen* (Seminar), Mitveranstalter: A. Andrzejak (ZIB)

WS 03/04 *IA-64 versus Power4: Architektur und effiziente Programmierung* (Vorlesung, Übungen, Projekt), Mitveranstalter: F. Hupfeld, T. Schütt (ZIB)

SS 04 *Verteilte Systeme und Grid Computing* (Vorlesung), Mitveranstalter: F. Schintke (ZIB)

SS 04 *Forschungsseminar für Doktoranden und Diplomanden* (Seminar)

WS 04/05 *Autonomic Computing* (Seminar),
Mitveranstalter: A. Andrzejak (ZIB)

WS 04/05 *Forschungsseminar Grid Computing* (Seminar)

WS 04/05 *Große Datenmengen in webbasierten Umgebungen* (Ringvorlesung), Mitveranstalter: J.C. Freytag, U. Leser, F. Naumann (HUB)

Marc Steinbach: TU Berlin

WS 03/04 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

SS 04 *Nichtlineare Optimierung auf Szenariobäumen* (Vorlesung)

Marc Steinbach: HU Berlin

WS 03/04 *Forschungsseminar Numerik stochastischer Modelle* (Seminar, mit R. Henrion und W. Römisch)

SS 04 *Forschungsseminar Numerik stochastischer Modelle* (Seminar, mit R. Henrion und W. Römisch)

Thomas Steinke: FU Berlin

SS 04 *Visualisierung, Modellierung und Simulation von Biomolekülen* (Vorlesung, Software-Praktikum), Mitveranstalter: F. Cordes (ZIB)

WS 04/05 *Proteinstrukturvorhersage, (im Rahmen der Vorlesung „Algorithmische Bioinformatik“)* (Vorlesung)

Hinnerk Stüben: TU Berlin

WS 03/04 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung), Mitveranstalter: W. Baumann (ZIB)

Tjark Vredeveld: TU Berlin

WS 03/04 *Analysis I für Ingenieure (ET)* (Vorlesung)

SS 04 *Online Optimierung* (Vorlesung)

WS 04/05 *Randomisierte Algorithmen und probabilistische Analyse* (Vorlesung)

Tjark Vredeveld: Escuela Politécnica Nacional Quito, Ekuador

SS 04 *Online Optimization and Flows over Time* (Blockveranstaltung im Doktorandenprogramm *Programa Individual de Doctorado en Matemática Aplicada*)

Martin Weiser: FU Berlin

WS 03/04 *Computerorientierte Mathematik I* (Vorlesung)

WS 03/04 *Numerik der Optimalsteuerung* (Vorlesung, zusammen mit Peter Deuffhard)

SS 04 *Computerorientierte Mathematik II* (Vorlesung)

Martin Weiser, Illia Horenko: FU Berlin

SS 04 *Angewandte Optimierung* (Seminar)

7.3 Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

Wolfgang Dalitz, Wolfram Sperber

14.–16.09.2004 *Minisymposium „Mathematik und Internet“*, der Fachgruppe Information und Kommunikation (IuK) bei der Jahrestagung 2004 der DMV/ÖMG, Heidelberg

Peter Deuffhard

15.01.2004 *Korean-German Bilateral Symposium on Scientific Computing*, ZIB (gemeinsam mit BBAW (Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften) & KAST (Korean Academy of Science and Technology))

Martin Grötschel

23.02.–24.02.2004 *1. Sitzung des Wissenschaftlichen Beirats des DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“*, TU, Berlin

30.03.–01.04.2004 *Zentrumstage 2004 des DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“*, TU, Berlin

28.09.2004 *Ehrenkolloquium anlässlich des 90. Geburtstages von Prof. em. Dr.-Ing. Dr. h.c.mult. Werner Albring*, BBAW, Berlin

Hans-Christian Hege

02.–06. Februar 2004 *WSCG'2004, 12. Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision* (Mitglied des Programmkommittees), Pilzen, Tschechien

02.–04. Juni 2004 *SPBG'2004, Symposium on Point-Based Graphics, Eurographics/IEEE TVCG*, (Mitglied des Programmkommittees), Zürich, Schweiz

21.–25. Juni 2004 *International Summerschool on Geometry and Visualization*, (Mitveranstalter, Lecturer, Maubeuge, France)

08.-10. Juli 2004 *SGP'2004, 2. Eurographics Symposium on Geometry Processing (Mitglied des Programmkommittees)*, Nizza, Frankreich

10.-15. Okt. 2004 *Vis'2004, IEEE Visualization (Mitglied des Programmkommittees)*, Austin, Texas, USA

Bernd Kallies

18.-19.05.2004 *18. Darmstädter Molecular Modelling Workshop*, Erlangen

Konrad Polthier

21.-25.06.2004 *International Summerschool on Geometry and Visualization*, Maubeuge, Frankreich

Alexander Reinefeld

09.-13.03.2004 *Global Grid Forum (GGF-10)*, Humboldt-Universität zu Berlin

29.08.-03.09.2004 *Workshop „Future Generation Grids“*, Schloss Dagstuhl

Tagungen und Gäste am ZIB

8.1 Gastvorträge

- 12.01.2004** Jörn Loviscach (FB Elektrotechnik und Informatik, Hochschule Bremen):
Splines auf Subdivision Surfaces
- 09.02.2004** Bernd Oberknapp (UB der Universität Freiburg i. Br.):
Verteilte Authentifizierung und Autorisierung am Beispiel von ReDI
- 24.02.2004** A. Westerlund (Universität Linköping, Schweden):
Two Generalizations of the Held and Karp 1-tree Problem
- 15.03.2004** Andreas von Rhein (AG Nanophotonische Materialien, Universität Paderborn):
From Static to Dispersion-rich Photonic Crystals
- 16.03.2004** Claus Gruber (TU München):
Optimization of Resilient Communication Networks
- 17.03.2004** Ernst Althaus (MPI Saarbrücken):
Improving LP-Bounds for the Steiner Tree Problem
- 01.04.2004** Michael Lörzer (Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek,
Friedrich-Schiller-Universität Jena):
Die multimediale Bibliothek UrMEL der Friedrich-Schiller Universität Jena
- 15.04.2004** Cecile Jamois (MPI für Mikrostrukturphysik, Halle):
Waveguides in SOI-Based Planar Photonic Crystals for Application to Dispersion Compensation
- 30.04.2004** Kathrin Schroeder (Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt a. M.):
Epicur-Projekt der DDB: URN-Vergabe, aber wie?
- 10.05.2004** Matthias Rarey (Zentrum für Bioinformatik, Universität Hamburg):
Algorithms in Computer-aided Molecular Design: Molecular Docking, Similarity Searching and more ...
- 24.05.2004** Patrick Lo (Lingnan University, Hongkong, VR China):
Digital Library of Lingnan University (Hong Kong)
- 07.06.2004** Rumen Iliew (Friedrich-Schiller-Universität, Jena):
Low-index contrast photonic crystals and photonic crystal fibers
- 14.06.2004** Dirk Michaelis (Fraunhofer Institut für Angewandte Optik und Feinmechanik,
Jena):
How can micro-optics assist photonic crystal waveguide coupling
- 01.07.2004** Jean-Marc Espinasse (École Polytechnique, Paris, Frankreich):
*Nichtlineare gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme zur Steuerung von Verdicht-
erstationen in Gasnetzen*

- 05.07.2004** Mirek Majewski (College of Information Systems, Zayed University, United Arab Emirates):
Visualisierung un MuPAD
- 08.07.2004** Kai Nagel (TU Berlin):
Die Abbildung menschlichen Verhaltens in Verkehrssimulationen – Versuch einer Bestandsaufnahme
- 19.08.2004** Thomas Wolle (Universiteit Utrecht, Niederlande):
Contraction and Treewidth Lower Bounds
- 19.08.2004** Katharina Habermann (SUB Göttingen):
Virtuelle Fachbibliothek Mathematik - Intentionen und Ziele eines Entwicklungsvorhabens
- 27.08.2004** Markus Wacker (Fakultät für Informatik, WSI/GRIS, Universität Tübingen):
Simulation von visko-elastischen Textilien für virtuelle Anprobe und virtuelles Schneidern
- 29.09.-01.10.2004** Klaus Truemper (University of Texas, Dallas, USA):
Presentation of his new book: "Design of Logic-based Intelligent Systems"
- 15.10.2004** R. Iliew (Institut für Festkörpertheorie und -optik, Friedrich-Schiller-Universität, Jena):
Low-index contrast photonic crystals and photonic crystal fibers
- 26.10.2004** Chavdar Lozanov & Stanilov Grosio (Faculty of Mathematics and Informatics, Sofia University "St. Kliment Ohridski", Bulgarien):
Computert algebra – Applications in Geometry
- 29.10.2004** Folkmar Bornemann (Lehrstuhl für Numerische Mathematik, TU München):
Begegnungen eines Numerikers: von Monte Carlo zu Cauchy, Jacobi, Weber und Ramanujan
- 08.12.2004** Seif Haridi (SICS und KTH Stockholm, Schweden):
DKS – A Middleware for building serverless distributed Services and Applications running over the Internet
- 13.12.2004** Bernd Bodermann (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig):
Quantitative Mikroskopie
- 16.12.2004** Sven Krumke (TU Kaiserslautern):
Ein streng polynomialer Algorithmus für maximale Flüsse unter Budget-Restriktionen
- 16.12.2004** Annegret Wagler (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg):
The Imperfection Ratio of A-Perfect and Circular Perfect Graphs
- 16.12.2004** Rüdiger Schultz (Universiät Duisburg-Essen):
Risk Aversion in Stochastic Integer Programs

8.2 Gastaufenthalte

Andreas Westerlund (Universität Linköping, Schweden)
01.11.2003–30.04.2004

- Bernd Oberknapp** (Universitätsbibliothek Freiburg)
09.02.-11.02.2004
- Carsten Henkel** (Quantum Theory, Institut für Physik, Universität Potsdam)
16.02.2004
- Klaus Ceynowa** (Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen)
10.03.2004
- Andreas von Rhein** (AG Nanophotonische Materialien, Universität Paderborn)
15.03.2004
- Claus Gruber** (Technische Universität München)
15.-19.03.2004
- Ernst Althaus** (Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken)
16.03.-19.03.2004
- Antonella Munna** (Universität Bologna, Italien)
16.-20.03.2004
- Marc Gaetano** (École Supérieure en Sciences Informatiques, Sophia Antipolis, Frankreich)
29.03.-31.03.2004
- Yannis Chicha** (École Supérieure en Sciences Informatiques, Sophia Antipolis, Frankreich)
29.03.-31.03.2004
- Michael Lörzer** (Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek, Universität Jena)
01.04.2004
- Fanie Terblanche** (North-West University, Potchefstroom, Südafrika)
13.04.-24.04.2004
- Cecile Jamois** (Max-Planck-Institut fuer Mikrostrukturphysik, Halle)
15.04.2004
- Jean-Marc Espinasse** (École Polytechnique, Paris, Frankreich)
18.04.-17.07.2004
- Kathrin Schroeder** (Die Deutsche Bibliothek, Frankfurt a. M.)
30.04.2004
- Diego Recalde** (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ekuador)
01.05.-30.06. 2004
- Cornelia Kober** (FH Osnabrück)
07.-09.05.2004
- Gianpaolo Oriolo** (Università di Tor Vergata, Rom, Italien)
10.05.-04.06.2004
- Kenneth Stephenson** (Department of Mathematics, University of Tennessee, USA)
18.05.-17.06.2004
- Patrick Lo** (Lingnan University, Hongkong, VR China)
24.05.2004
- Luis Miguel Torres** (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ekuador)
04.06.-11.06.2004

- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques, EPFL, Lausanne)
28.–30.06.2004
- Karl–Viktor von Schöning** (Volkswagen AG, Wolfsburg)
28.–30.06.2004
- Erhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)
28.–30.06.2004
- Wolfgang Branoner** (Microsoft Deutschland GmbH)
29.–30.06.2004
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
29.–30.06.2004
- Kai Nagel** (TU Berlin)
08.07.2004
- Charles R. Croissant** (Saint Louis University, St. Louis, USA)
12.07.2004
- Thomas Wolf** (Brock University, St. Catharines, Kanada)
18.07.–22.07.2004
- Thomas Wolle** (Universiteit Utrecht, Utrecht, Niederlande)
16.08.–20.08.2004
- Katharina Habermann** (Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen)
19.08.2004
- Sebastian Grasreiner** (Ilmenau)
09.09.2004
- Mariya Kutowski** (Hannover)
10.09.2004
- Luca Pavarino** (Dipartimento di Matematica, Università di Milano, Italien)
14.09.2004
- Maria López Fernández** (Dipartimento de Matemática aplicada Escuela Politécnica,
Universidad de Valladolid, Spanien)
20.—29.09.2004
- Klaus Truemper** (University of Texas, Dallas, USA)
27.09.–05.10.2004
- Werner C. Rheinboldt** (Pittsburgh, Pennsylvania, USA)
01.10.–30.11.2004
- Alexander Geyken** (BBAW, Berlin)
04.10.2004
- Xavier Muñoz** (Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spanien)
13.10.2004
- Rumen Iliew** (Friedrich-Schiller-Universität, Jena)
15.10.2004
- Triffon Triffonov** (Faculty of Mathematics and Informatics, Sofia University “St. Kliment
Ohridski”, Bulgarien)
25.–30.10.2004

Kalin Georgiev (Faculty of Mathematics and Informatics, Sofia University “St. Kliment Ohridski”, Bulgarien)

25.–30.10.2004

Claudia Augustin (ZALF Müncheberg)

02.11.2004

Volker Türck (Infineon Fiber Optics, Berlin)

03.11.2004

Ulrike Flach (MdB)

10.11.2004

Thomas Böhme (TU Ilmenau)

15.11.2004

Gerhard Heyer (Universität Leipzig)

15.11.2004

Hans Friedrich Witschel (Universität Leipzig)

15.11.2004

Alexander Martin (TU Darmstadt)

06.12.2004

Seif Haridi (SICS und KTH Stockholm, Schweden)

08.-10.12.2004

Hoang Xuan Phu (Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam)

09.12.2004

Bernd Bodermann (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig)

13.12.2004

Reinhard Schneider (European Molecular Biology Laboratory (EMBL), Heidelberg)

15.-17.12.2004

09.12.2004

Rüdiger Schultz (Universität Duisburg)

16.–17.12.2004

Sven O. Krumke (Technische Universität Kaiserslautern)

16.–17.12.2004

Annegret Wagler (Otto-von-Guericke Universität Magdeburg)

16.–17.12.2004

8.3 Tagungen und Veranstaltungen

03.03.2004 BCB-Seminar

Veranstalter: Frank Cordes, Thomas Steinke

01.04.2004 Workshop zu Multimedia in Bibliotheken am Beispiel der University Multimedia Electronic Library (UrMel) der Friedrich-Schiller-Universität Jena

Veranstalter: KOBV-Zentrale

- 23.04.2004** Einsatz des Online-Navigations- und Schulungssystems „Lotse“
Veranstalter: KOBV-Zentrale gemeinsam mit der Virtuellen Fachbibliothek Ethnologie der HU Berlin
- 30.04.2004** Workshop zu Persistent Identifier – Uniform Resource Names (URN)
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 10.05.2004** 3. KOBV-Forum – Strategie-Workshop
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 12.07.2004** Workshop zu MARC21
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 15.–16.07.2004** Tandem-Workshop of DFG Research Center on “Nonlinear Optimization and Discrete Geometry”
Veranstalter: Konrad Polthier
- 27.08.2004** HEP D-Grid
Veranstalter: Hinnerk Stüben
- 29.09.–01.10.2004** Workshop „Design of Logic-based Intelligent Systems“ ZIB, Berlin
- 11.10.–12.10.2004** BMBF-Workshop „Math&Industry“ ZIB, Berlin
- 18.–20.10.2004** Herbsttagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund (in Kooperation mit dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen zu Berlin), ZIB, Berlin
- 21.–22.10.2004** 1. Tagung der deutschsprachigen MetaLib/SFX-Anwendergruppe
Veranstalter: KOBV-Zentrale
- 26.11.2004** COST D23 Meeting
Veranstalter: Thomas Steinke
- 16.12.2004** ZACK-Workshop für Einsteiger, ZIB, Berlin
Veranstalter: KOBV-Zentrale

8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 23.–26.03.2004** 2. Leipziger Kongress für Information und Bildung „Information macht Bildung“, Leipzig:
Demonstration der KOBV-Internet-Dienste (KOBV-Suchmaschine, KOBV-Portal, KOBV-Bibliothekenführer, Online-Fernleihe): Hildegard Franck, Lavinia Hodoroba, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Christian Oesterheld, Raluca Radu, Beate Rusch
- 02.–05.04.2001** 91. Deutscher Bibliothekartag “Bibliotheken - Portale zum globalen Wissen” in Bielefeld:
Demonstration der KOBV-Suchmaschine – Version 2: Hildegard Franck, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Dagmar Otto, Beate Rusch
- 20.–21.09.2004** Sun Summit Bibliotheken 2004 „Bibliotheken rechnen sich nicht – Bibliotheken zahlen sich aus“, Berlin:
Demonstration der KOBV-Internet-Dienste (KOBV-Suchmaschine, KOBV-Portal, KOBV-Bibliothekenführer): Andres Imhof, Lavinia Hodoroba, Monika Kuberek

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. Weiterhin werden aktuelle Forschungsarbeiten aus der Informatik und die vorhandenen Systeme im Rechner- und Datenraum mit den roboterbedienten Bandsilos vorgestellt. 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.

- 19.01.2004** Teilnahme an der Diskussionsrunde: „In der Mathematik sind sich alle einig und die Gesellschaft hat von ihr nichts zu befürchten“, Veranstaltung der Reihe „Wissenschaft kontrovers – Eine Selbstbefragung über Geld, Kultur und Qualität“, Collegium Helveticum, ETH Zürich, Schweiz,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 20.01.2004** Mathematik für die Müllabfuhr: Das Chinesische Postbotenproblem, MATHEON/Urania Berlin,
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal
- 22.01.2004** Mathe ist überall drin, Luitpold-Gymnasium Wasserburg am Inn,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 16.02.2004** Schülergruppe der Lise-Meitner-Schule Berlin-Neukölln (OSZ für Chemie, Physik und Biologie),
Veranstalter: Daniel Baum, Wolfgang Baumann, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Adrian Zymolka,
- 17.02.2004** Studenten des Studiengangs Physikalische Ingenieurwissenschaft der TU Berlin, Vortrag zum High Performance Computing und Besichtigung der Hochleistungsrechner,
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Ralf Götz
- 18.02.2004** Handys, SMS und Klingeltöne - was hat Mathematik damit zu tun?, Kopernikus-Gymnasium, Blankenfelde,
Veranstalter: Arie M.C.A. Koster
- 15.03.2004** Besuch einer Schülergruppe der Lise-Meitner-Schule, Leistungskurs Informatik
Veranstalter: Peter Deuffhard, Ralf Kähler, Bernd Kallies, Adrian Zymolka
- 29.03.2004** Mathematik für die Müllabfuhr: Das Chinesische Postbotenproblem, Heinrich-Hertz-Gymnasium Berlin,
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal
- 02.04.2004** Mathematik für die Müllabfuhr: Das Chinesische Postbotenproblem, Heinrich-Hertz-Gymnasium Berlin,
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal

- 22.04.2004** Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie, Präsentation zum Girls-day 2004, MPI für Gravitationsphysik,
Veranstalter: Ralf Kähler
- 07.05.2004** 449 153, Boni, Leo, and Dd, Dd60 „Scientific Festival“, ZIB, Berlin,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 13.05.2004** Studenten der Vrije Universiteit Amsterdam, Niederlande, Vorträge zu den Themen 3D-Wissenschaftskino, Scientific Computing, Grid Computing and Management of Distributed Data und zum High Performance Computing sowie Besichtigung der Hochleistungsrechner,
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Vincent Jasper Dercksen, Ralf Kähler, Ulrich Nowak, Florian Schintke, Ralf Götz
- 15.05.2004** 9. Berliner Tag der Mathematik, FU Berlin,
Veranstalter: Tjark Vredeveld, Marcus Weber, Martin Weiser, Brigitte Lutz-Westphal
- 12.06.2004** Herausragende Veranstaltung im Jahr 2004 war wieder die Beteiligung des ZIB mit neun Präsentationen in der „Langen Nacht der Wissenschaften“. Geboten wurden u.a.: 3D-Wissenschaftskino mit Visualisierungen aus naturwissenschaftlichen und medizinischen Anwendungsprojekten des ZIB, Beispiele für den Einsatz mathematischer Methoden zur Planung chirurgischer Eingriffe und zur sogenannten Online Optimierung sowie Führungen zur Besichtigung der Hochleistungsrechner. Insgesamt wurden ca. 800 Besucher im ZIB gezählt, von denen etwa 330 Personen an den Supercomputerführungen teilnahmen, obwohl teilweise längere Wartezeiten in Kauf genommen werden mussten, da die Führungen aus Sicherheitsgründen nur in Kleingruppen stattfinden konnten. Auch in diesem Jahr wurde ein spezielles Kinderprogramm geboten (120 Teilnehmer). Mit Vorträgen waren an der Langen Nacht der Wissenschaften beteiligt:
- Wolfgang Baumann: Hochleistungsrechner der Extraklasse
 - Bodo Erdmann: Mathematik mit Biss und Lächeln
 - Hans-Hermann Frese: Hochleistungsrechner der Extraklasse
 - Hans-Christian Hege: 3D-Wissenschaftskino
 - Felix Hupfeld: StorageBox – Persönliche Dateiverwaltung der nächsten Generation
 - Andres Imhof: Lost in Hyperspace: Suchen und Finden im Internet
 - Bernd Kallies: Wissenschaftliches Rechnen am ZIB
 - Dirk Krickel: Mathe + Computer = ZIB
 - Hans Lamecker: 3D-Wissenschaftskino
 - Alexander Maye: 3D-Wissenschaftskino
 - Ulrich Nowak: Mathematik mit Biss und Lächeln
 - Olaf Paetsch: Mathe + Computer = ZIB
 - Beate Rusch: Lost in Hyperspace: Suchen und Finden im Internet
 - Wolfram Sperber: Lost in Hyperspace: Suchen und Finden im Internet
 - Detlev Stalling: 3D-Wissenschaftskino
 - Hinnerk Stüben: Hochleistungsrechner der Extraklasse
 - Brygg Ullmer: Neue 3D-Interaktionsmethoden
 - Tjark Vredefeld: Welche BahnCard soll ich kaufen?
 - Andreas Wendleder: 3D-Wissenschaftskino

- Stefan Zachow: 3D-Wissenschaftskino
- Horst Zuse (extern): Erfindung des Computers

- 21.06.2004** Das Telota-Projekt der BBAW, TeloTag der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, BBAW, Berlin,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 01.07.2004** Besuch von Schülern des Heisenberg-Gymnasiums in Gladbeck
Veranstalter: Daniel Baum, Frank Cordes, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Hans Lamecker, Tjark Vredefeld, Lin Werner Zschiedrich
- 03.07.2004** DAAD Stipendiatentreffen 2004 in Berlin, Vorträge zur wissenschaftlichen Visualisierung und zum High Performance Computing, sowie Besichtigung der Hochleistungsrechner,
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Hubert Busch, Hans-Christian Hege, Ralf Götz
- 08.07.2004** “Malen nach Zahlen” – Wissenschaftliche Visualisierung, Kurs der Deutschen Schülerakademie, Braunschweig, 08.-24.07.2004,
Veranstalter: Hans Lamecker
- 22.07.2004** The DFG Research Center for Key Technologies, Chinese Delegation, DFG-Forschungszentrum MATHEON, TU Berlin,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 30.08.2005** Besuch einer Schülergruppe des Ingrid Jespersen Gymnasiums, Kopenhagen, Dänemark
Veranstalter: Konrad Polthier, Bernd Kallies
- 24.09.2004** Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, Märkisches Gymnasium, Schwelm,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 28.09.2004** Besuch von Schülern der Lise-Meitner-Schule Berlin, Wissenschaftliches Rechnen am ZIB,
Veranstalter: Hubert Busch, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Adrian Zymolka
- 28.09.2004** Werner Albring und Schwelm, Symposion Werner Albring zu Ehren, BBAW, Berlin,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 01.10.2004** Mathematik: Öde Fummelei oder moderne Schlüsseltechnologie, Humboldt-Gymnasium, Eichwalde,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 18.10.2004** The DFG Research Center for Key Technologies, G-8 Working Group on Research Assessment, ZIB,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 25.10.2004** Abiturienten des Albert-Schweitzer-Gymnasiums Eisenhüttenstadt, Vorträge zum Wissenschaftlichen Rechnen und zum High Performance Computing am ZIB sowie Besichtigung der Hochleistungsrechner,
Veranstalter: Ralf Borndörfer, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Stefan Zachow

- 26.10.2004** Der Schnellste Weg zum Ziel – Mathematik in Transport und Verkehr, Emil-Fischer-Akademievortrag, Emil-Fischer-Gymnasium Schwarzheide
Veranstalter: Ralf Borndörfer
- 29.10.2004** Ein doppeltes Grußwort zur Verleihung des Medienpreises der DMV, Grußwort als Vertreter der BBAW und des MATHEON anlässlich der Verleihung des DMV-Medienpreises, BBAW, Berlin,
Veranstalter: Martin Grötschel
- 30.11.2004** Mathe ist überall drin, Regine-Hildebrandt-Schule, Birkenwerder,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 30.11.2004** Das Lächeln der Mathematiker – Operationsplanung in der Gesichtschirurgie, Barnim Gymnasium, Bernau,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 01.12.2004** Mathe ist überall drin, Weinberg Gymnasium, Kleinmachnow,
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 15.12.2004** Studenten der Angewandten Informatik der FHTW Berlin, Vortrag zum High Performance Computing und Besichtigung der Hochleistungsrechner,
Veranstalter: Wolfgang Baumann
- 15.12.2004** Mathematik für die Müllabfuhr: Das Chinesische Postbotenproblem, Hermann-Hesse-Schule Berlin,
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal

Organisatorisches

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984¹ gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuss des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 2004 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, HUB, Vorsitzender
- Prof. Dr. Jörg Steinbach, TUB, stellvertretender Vorsitzender — bis 15.07.2004
Prof. Dr.-Ing. Klaus Petermann, TUB, stellvertretender Vorsitzender — ab 16.07.2004
- Prof. Dr. Helmut Keupp, FUB
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Wissenschaft, Forschung und Kultur
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Arbeit und Frauen
- Prof. Dr. Manfred Hennecke, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Prof. Dr. Michael Steiner, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH
- Prof. Dr. Jens Reich, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin

Der Verwaltungsrat tagte am 30. Januar und 16. Juli 2004.

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 Beirates².

¹<http://www.zib.de/General/Organization/gesetz/index.de.html>

²<http://www.zib.de/General/Organization/satzung/index.de.html>

9.3 Wissenschaftlicher Beirat

Aufgabe des Wissenschaftlichen Beirates ist die Beratung des ZIB in wissenschaftlichen und technischen Fragen sowie die Unterstützung und Förderung der Arbeit des ZIB, insbesondere bei der Herstellung und Aufrechterhaltung von Kooperationen mit Universitäten, Forschungseinrichtungen und der Industrie.

Der Verwaltungsrat hat als Mitglieder des Wissenschaftlichen Beirates bestellt:

Prof. Dr. Alfred Louis	– Universität des Saarlandes, Saarbrücken Sprecher des Beirates
Wolfgang Branoner	– Microsoft Deutschland GmbH, Berlin
Prof. Dr. Wolfram Büttner	– Infineon Technologies AG, München
Prof. Dr. Thomas Liebling	– Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne–Ecublens, Schweiz
Dr. Joachim Römelt	– Bayer HealthCare AG, Leverkusen
Prof. Dr. Karl–Viktor von Schönning	– Volkswagen AG, Wolfsburg
Dr. Horst D. Simon	– NERSC, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA
Dr.–Ing. Ehrhard Winter	– E–Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 29. und 30. Juni 2004 im ZIB.

9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. DFN — Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V.
2. DMV — Deutsche Mathematiker–Vereinigung e.V.
3. ECMI — European Consortium for Mathematics in Industry
4. FAV — Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
5. Forum für Zukunftsenergien
6. IDW — Informationsdienst Wissenschaft e.V.
7. IWI — Institut für wissenschaftliche Information e.V.
8. Konrad–Zuse–Gesellschaft
9. NAG Users Association
10. OpTecBB — Optische Technologien aus Berlin und Brandenburg
11. SIAM — Society for Industrial and Applied Mathematics
12. UNICORE Forum e.V.
13. ZKI — Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e.V.
14. 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 2004 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

- Dr. Reinhard Hochmuth (Technische Universität Bergakademie Freiberg)
Mathematische Multiskalen-Modellierung in der Neurobiologie
- Prof. Dr. Rolf Krause (Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn)
Numerische Simulation in der Operationsplanung
- Prof. Dr. Sven O. Krumke (Technische Universität Kaiserslautern)
Online-Disposition von Einsatzfahrzeugen
- Prof. Dr. Markus Wacker (Universität Tübingen)
Numerische Textilmodellierung
- Dr. Thomas Wolf (University of London/Brock University, Kanada)
*Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen;
symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie*

9.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzt sich nach den Personalratswahlen 2004 wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)
Hans-Florian Geerdes
Marlies Engelke
Bodo Erdmann
Gabriele Kempf
Thorsten Koch
Dirk Krickel

9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die im Berichtsjahr 2004 nochmals verstärkt deutlich gewordenen finanziellen Schwierigkeiten des Landes Berlin geprägt — eine Situation, die immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausstattung zu 100% vom Land finanzierten Einrichtung zu beeinträchtigen droht. Die im Sommer 2003 vereinbarten spürbaren Kürzungen der Gehälter aller Beschäftigten im öffentlichen Dienst des Landes Berlin zeigen das finanzielle Dilemma deutlich auf. Die besondere Situation im Wissenschaftsbereich ist in den Tarifregelungen in keiner Weise berücksichtigt — ein Zustand der für ein in weiten Teilen aus Drittmitteln finanziertes Institut und für dessen Beschäftigte absurde Konsequenzen zur Folge hat. Deutlich spürbar geworden ist in diesem Zusammenhang die mangelnde Wettbewerbsfähigkeit des ZIB und anderer vom Berliner Tarifrecht beeinflusster Forschungseinrichtungen bei der Gewinnung von hochqualifizierten Wissenschaftlern; zunehmend sind hier Misserfolge zu verzeichnen, die unmittelbar mit den verschlechterten Einkommensbedingungen zusammenhängen. Da zudem die Drittmiteinnahmen aus Indu-

strie und Wirtschaft in bestimmten Teilbereichen wie z.B. der Telekommunikation auf einem sehr niedrigen Stand verharren, sind die finanziellen Ausblicke nach wie vor 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. Die erforderliche Anmeldung zur "Blauen Liste" ist erfolgt, gilt aber sowohl aufgrund des Umfangs der bereits bestehenden Warteliste als auch im Zusammenhang mit möglichen Konsequenzen der Föderalismusdiskussion als wenig aussichtsreich.

Der Zuschuss des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2004 "überrollt" und in gleicher Höhe wie für 2003 eingestellt worden. Für die entscheidungsreifen *investiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnte die Beschaffung des HLRN-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 20,5 Millionen Euro in 2004 weitgehend abgeschlossen werden. Das IBM-System ist im Dezember 2004 nach längeren Verzögerungen und verschiedenen Umbaumaßnahmen abgenommen worden.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2004 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 13.578 T€; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 10.685 T€ und auf Investitionen 2.893 T€.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss von 6.881 T€ (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmiteinnahmen ist – vor Prüfung des Jahresabschlusses – mit 3.750 T€ anzusetzen. Damit werden die Drittmiteinnahmen zwar geringer sein als in der Ausnahmesituation der beiden Vorjahre (4.283 T€ bzw. 4.181 T€), erneut aber einen sehr guten Wert erreichen. Bezogen auf den Wirtschaftsplan 2004 ist ein nahezu ausgeglichener Jahresabschluss 2004 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 9.1 (Jahresabschlussrelevante Angaben) ablesen.

	Drittmiteleinnahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte T€	Sonstige Einnahmen T€	Einnahmen insgesamt T€
	Wirtschaft/ Industrie T€	öffentliche Mittel T€	insgesamt T€	konsumentiv T€	investiv T€			
1993	366	410	776	4.140	931	175	70	6.092
1994	910	875	1.785	4.245	4.472	3.834	77	14.413
1995	1.395	600	1.995	4.681	2.322	1.683	48	10.729
1996	1.253	755	2.008	4.863	511	0	48	7.430
1997	1.295	1.330	2.625	7.330 ¹	409	0	180	10.544
1998	1.102	1.926	3.028	7.514	434	0	46	11.022
1999	1.655	1.743	3.398	7.592 ²	1.324	890	92	13.296
2000	1.375	1.911	3.286	7.222	537	0	148	11.193
2001	1.186	2.233	3.419	7.018	802	740	242	12.221
2002	1.003	3.178	4.181	6.711	1.411	2.725	183	15.211
2003	785	3.498	4.283	7.105	1.976	6.734	147	20.245
2004 ³	777	2.973	3.750	6.881	435	1.227	211	12.504

Tabelle 9.1: Einnahmen-Entwicklung
— ohne BRAIN-Serviceanteil —

¹Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

²Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

³voraussichtliches Ist 2004 – vor Prüfung des Jahresabschlusses

Die Entwicklung der Drittmiteinnahmen — für 2004 voraussichtliche Ist-Zahlen — lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

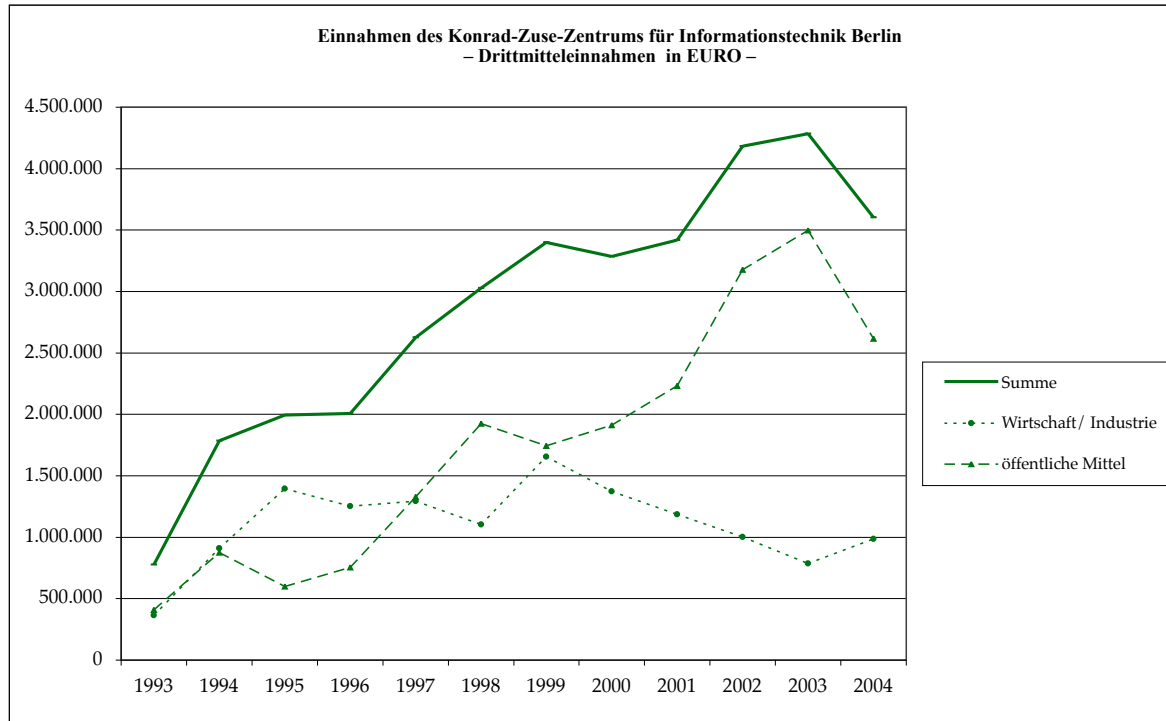


ABBILDUNG 9.1: Drittmittel-Entwicklung

9.8 Personelle Entwicklung

Die Personalmittel für die planmäßigen Mitarbeiter (80,5 Stellen, — 6 Beamten- und 74,5 Angestelltenstellen — davon 2 Stellen ohne Bezüge und eine 0,5 Stelle durch Wegfallvermerk nicht finanziert) sind aufgrund einer Änderung der gesetzlichen Grundlagen seit 1997 im Wirtschaftsplan des ZIB ausgewiesen. Durch die deutlich über dem Durchschnitt liegenden Altersstruktur der unbefristet beschäftigten Belegschaft besteht im Personalhaushalt eine besondere finanzielle Belastung, die bisher durch personalwirtschaftliche Maßnahmen und Drittmiteinnahmen abgedeckt werden konnte. Unabhängig von ihrer Finanzierung entwickelte sich die Zahl der Beschäftigten wie folgt:

	01.01.2004	01.01.2005
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	89	88
Servicepersonal	49	50
KOBV-Zentrale	14	14
Studentische Hilfskräfte	51	63
Insgesamt	207	219

ABBILDUNG 9.2: Personal-Entwicklung

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2005 insgesamt 143 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 76 Beschäftigte finanziert.

Ansprechpartner

Präsident: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard
 Lehrstuhl *Scientific Computing* am Fachbereich
 Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin
 Tel. (030) 841 85 – 101

Vizepräsident: Prof. Dr. Martin Grötschel
 Lehrstuhl *Diskrete Mathematik* am Institut für
 Mathematik der Technischen Universität Berlin
 Tel. (030) 841 85 – 210

Bereichsleiter
 Computer Science: Prof. Dr. Alexander Reinefeld
 Lehrstuhl *Praktische Informatik* am Institut für
 Informatik der Humboldt–Universität zu Berlin
 Tel. (030) 841 85 – 130

Bereichsleiter
 Verwaltung: Henry Thieme
 Tel. (030) 841 85 – 100

Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard/ Dr. Martin Weiser	841 85–101 841 85–170
Visualisierung & Datenanalyse:	Hans–Christian Hege, Hon. Prof.	841 85–141
Optimierung:	Prof. Dr. Martin Grötschel/ PD Dr. Volker Kaibel	841 85–210 841 85–211
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85–173
Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld	841 85–130
High Performance Computing:	Hubert Busch	841 85–135
IT Services:	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

Anhang: Übersicht Preprints

Report 04-01. Martin Weiser; Peter Deuffhard; Bodo Erdmann. *Affine conjugate adaptive Newton methods for nonlinear elastomechanics.*

Abstract: The paper extends affine conjugate Newton methods from convex to nonconvex minimization, with particular emphasis on PDE problems originating from compressible hyperelasticity. Based on well-known schemes from finite dimensional nonlinear optimization, three different algorithmic variants are worked out in a function space setting, which permits an adaptive multilevel finite element implementation. These algorithms are tested on two well-known 3D test problems and a real-life example from surgical operation planning.

Report 04-02. Peter Deuffhard; Hyung Yong Ra (Chairs). *Korean-German Bilateral Symposium on Scientific Computing.*

Abstract: Collection of abstracts of the Korean-German Bilateral Symposium on Scientific Computing, Berlin January 15/16, 2004

Report 04-03. Marcus Weber. *Clustering by using the simplex structure.*

Abstract: In this paper we interpret clustering as a mapping of data into a simplex. If the data itself has simplicial structure this mapping becomes linear. Spectral analysis is an often used tool for clustering data. We will show that corresponding singular vectors or eigenvectors comprise simplicial structure. Therefore they lead to a cluster algorithm, which consists of a simple linear mapping. An example for this kind of algorithms is the Perron cluster analysis (PCCA). We have applied it in practice to identify metastable sets of molecular dynamical systems. In contrast to other algorithms, this kind of approach provides an a priori criterion to determine the number of clusters. In this paper we extend the ideas to more general problems like clustering of bipartite graphs.

Report 04-04. Andreas Bley; Thorsten Koch; Roland Wessály. *Large-scale hierarchical networks: How to compute an optimal architecture?*

Appeared in Networks 2004: 11th International Telecommunications Network Strategy and Planning Symposium 2004, pp. 13-16, H. Kaindl (ed.), VDE Verlag, ISBN 3-8007-2840-0

Abstract: In this article we present a mathematical model and an algorithm to support one of the central strategic planning decisions of network operators: How to organize a large number of locations into a hierarchical network? We propose a solution approach that is based on mixed-integer programming and Lagrangian relaxation techniques. As major advantage, our approach provides not only solutions but also worst-case quality guarantees. Real-world scenarios with more than 750 locations have been solved within 30 minutes to less than 1% off optimality.

Report 04-05. Kurt Helmes; Stefan Röhl. *A Geometrical Characterization of the Multidimensional Hausdorff and Dale Polytopes with Applications to Exit Time Problems.*

Abstract: We present formulae for the corner points of the multidimensional Hausdorff and Dale Polytopes and show how these results can be used to improve linear programming models for computing e. g. moments of exit distribution of diffusion processes. Specifically, we compute the mean exit time of twodimensional Brownian motion from the unit square and the unit triangle, as well as higher moments of the exit time of time space Brownian motion from a triangle.

Report 04-06. Annegret Wagler. *The Normal Graph Conjecture is true for Circulants.*

Abstract: Normal graphs are defined in terms of cross-intersecting set families: a graph is normal if it admits a clique cover \mathcal{Q} and a stable set cover \mathcal{S} s.t. every clique in \mathcal{Q} intersects every stable set in \mathcal{S} . Normal graphs can be considered as closure of perfect graphs by means of co-normal products (Körner 1973) and graph entropy (Cziszár et al. 1990). Perfect graphs have been recently characterized as those graphs without odd holes and odd antiholes as induced subgraphs (Strong Perfect Graph Theorem, Chudnovsky et al. 2002). Körner and de Simone observed that C_5 , C_7 , and \overline{C}_7 are minimal not normal and conjectured, as generalization of the Strong Perfect Graph Theorem, that every C_5 , C_7 , \overline{C}_7 -free graph is normal (Normal Graph Conjecture, Körner and de Simone 1999). We prove this conjecture for a first class of graphs that generalize both odd holes and odd antiholes, the circulants, by characterizing all the normal circulants.

Report 04-07. Andreas Eisenblätter; Hans-Florian Geerdes; Thorsten Koch; Ulrich Türke. *MOMENTUM Data Scenarios for Radio Network Planning and Simulation (Extended Abstract)*.

A short version (extended abstract) is published in: Proc. of WiOpt '04. Cambridge, UK, 2004

Abstract: We present publicly available data sets related to research on wireless networks. The scenarios contain a wide range of data and are detailed in all aspects. To our knowledge, this is the most realistic, comprehensive, and detailed *public* data collection on mobile networking. We indicate example uses of this data collection in applications related to UMTS.

Report 04-08. Michael Joswig; Frank H. Lutz. *One-Point Suspensions and Wreath Products of Polytopes and Spheres*.

Abstract: It is known that the suspension of a simplicial complex can be realized with only one additional point. Suitable iterations of this construction generate highly symmetric simplicial complexes with various interesting combinatorial and topological properties. In particular, infinitely many non-PL spheres as well as contactible simplicial complexes with a vertex-transitive group of automorphisms can be contained in this way.

Report 04-09. Hans Lamecker; Thomas Lange; Martin Seebaß. *Segmentation of the Liver using a 3D Statistical Shape Model*.

Abstract: This paper presents an automatic approach for segmentation of the liver from computer tomography (CT) images based on a 3D statistical shape model. Segmentation of the liver is an important prerequisite in liver surgery planning. One of the major challenges in building a 3D shape model from a training set of segmented instances of an object is the determination of the correspondence between different surfaces. We propose to use a geometric approach that is based on minimizing the distortion of the correspondence mapping between two different surfaces. For the adaption of the shape model to the image data a profile model based on the grey value appearance of the liver and its surrounding tissues in contrast enhanced CT data was developed. The robustness of this method results from a previous nonlinear diffusion filtering of the image data. Special focus is turned to the quantitative evaluation of the segmentation process. Several different error measures are discussed and implemented in a study involving more than 30 livers.

Report 04-10. Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Marc E. Pfetsch. *Models for Line Planning in Public Transport*.

Abstract: The *line planning problem* is one of the fundamental problems in strategic planning of public and rail transport. It consists of finding lines and corresponding frequencies in a public transport network such that a given travel demand can be satisfied. There are (at least) two objectives. The transport company wishes to minimize its operating cost; the passengers request short travel times. We propose two new multi-commodity flow models for line planning. Their main features, in comparison to existing models, are that the passenger paths can be freely routed and that the lines are generated dynamically.

Report 04-11. Frank H. Lutz. *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Centrally Symmetric Spheres and Products of Spheres*.

Abstract: The aim of this paper is to give a survey of the known results concerning centrally symmetric polytopes, spheres, and manifolds. We further enumerate nearly neighborly centrally symmetric spheres and centrally symmetric products of spheres with dihedral or cyclic symmetry on few vertices, and we present an infinite series of vertex-transitive nearly neighborly centrally symmetric 3-spheres.

Report 04-12. Cornelia Kober; Bodo Erdmann; Christian Hellmich; Robert Sader; Hans-Florian Zeilhofer. *Anisotropic Simulation of the Human Mandible*.

Abstract: We focus on the role of anisotropic elasticity in the simulation of the load distribution in a human mandible due to a lateral bite on the leftmost premolar. Based on experimental evidence, we adopt “local” orthotropy of the elastic properties of the bone tissue. Since the trajectories of anisotropic elasticity are not accessible from Computer Tomographic (CT) data, they will be reconstructed from (i) the organ’s geometry and (ii) from coherent structures which can be recognized from the spatial distribution of the CT values. A sensitivity analysis comprising various 3D FE simulations reveals the relevance of elastic anisotropy for the load carrying behavior of a human mandible: Comparison of the load distributions in isotropic and anisotropic simulations indicates that anisotropy seems to “spare” the mandible from loading. Moreover, a maximum degree of anisotropy leads to a kind of a load minimization of the mandible, expressed by a minimum of different norms of local strain, evaluated throughout the organ. Thus, we may suggest that anisotropy is not only relevant, but also in some sense “optimal”.

Report 04-13. Tobias Achterberg; Thorsten Koch; Alexander Martin. *Branching Rules Revisited.*

Appeared in : Operation Research Letters 33 (2005), pp. 42-54

Abstract: Mixed integer programs are commonly solved with linear programming based branch-and-bound algorithms. The success of the algorithm strongly depends on the strategy used to select the variable to branch on. We present a new generalization called *reliability branching* of today's state-of-the-art *strong branching* and *pseudocost branching* strategies for linear programming based branch-and-bound algorithms. After reviewing commonly used branching strategies and performing extensive computational studies we compare different parameter settings and show the superiority of our proposed new strategy.

Report 04-14. Ralf Borndörfer; Andreas Löbel; Steffen Weider. *A Bundle Method for Integrated Multi-Depot Vehicle and Duty Scheduling in Public Transit.*

Abstract: This article proposes a Lagrangean relaxation approach to solve integrated duty and vehicle scheduling problems arising in public transport. The approach is based on the proximal bundle method for the solution of concave decomposable functions, which is adapted for the approximate evaluation of the vehicle and duty scheduling components. The primal and dual information generated by the bundle method is used to guide a branch-and-bound type algorithm. Computational results for large-scale real-world integrated vehicle and duty scheduling problems with up to 1,500 timetabled trips are reported. Compared with the results of a classical sequential approach and with reference solutions, integrated scheduling offers remarkable potentials in savings and drivers' satisfaction.

Report 04-15. Andreas Eisenblätter; Hans-Florian Geerdes; Thorsten Koch; Alexander Martin; Roland Wessälly. *UMTS Radio Network Evaluation and Optimization beyond Snapshots.*

Abstract: This paper is concerned with UMTS radio network design. Our task is to reconfigure antennas and the related cells as to improve network quality. In contrast to second generation GSM networks, *interference* plays a paramount role when designing third generation radio networks. A known compact formulation for assessing the interference characteristics of a radio network as coupling relations between cells based on user snapshots is generalized to statistical average load. This enables us to overcome the notorious difficulties of snapshot-based network optimization approaches. We recall a mixed-integer programming model for the network design problem that is based on user snapshots and contrast it with a new network design model based on the average coupling formulation. Exemplarily focusing on the important problem of optimizing antenna tilts, we give computational results for a fast local search algorithm and the application of a MIP solver to both models. These results demonstrate that our new average-based approaches outperform state-of-the-art snapshot models for UMTS radio network optimization.

Report 04-16. Cornelia Kober; Bodo Erdmann; Jens Lang; Robert Sader; Hans-Florian Zeilhofer. *Adaptive Finite Element Simulation of the Human Mandible Using a New Physiological Model of the Masticatory Muscles.*

Abstract: Structural mechanics simulation of bony organs is of general medical and biomechanical interest, because of the interdependence of the inner architecture of bone and its functional loading already stated by Wolff in 1892. This work is part of a detailed research project concerning the human mandible. By adaptive finite element techniques, stress/strain profiles occurring in the bony structure under biting were simulated. Estimates of the discretization errors, local grid refinement, and multilevel techniques guarantee the reliability and efficiency of the method. In general, our simulation requires a representation of the organ's geometry, an appropriate material description, and the load case due to teeth, muscle, or joint forces. In this paper, we want to focus on the influence of the masticatory system. Our goal is to capture the physiological situation as far as possible. By means of visualization techniques developed by the group, we are able to extract individual muscle fibres from computed tomography data. By a special algorithm, the fibres are expanded to fanlike (esp. for the musc. temporalis) coherent vector fields similar to the anatomical reality. The activity of the fibres can be adapted according to compartmentalisation of the muscles as measured by electromyological experiments. A refined sensitivity analysis proved remarkable impact of the presented approach on the simulation results.

Report 04-17. Benjamin Hiller; Sven O. Krumke; Jörg Rambau. *Reoptimization Gaps versus Model Errors in Online-Dispatching of Service Units for ADAC.*

Abstract: Under high load, the automated dispatching of service vehicles for the German Automobile Association (ADAC) must reoptimize a dispatch for 100–150 vehicles and 400 requests in about ten seconds to near optimality. In the presence of service contractors, this can be achieved by the column generation algorithm ZIBDIP. In metropolitan areas, however, service contractors cannot be dispatched automatically because they may decline. The problem: a model without contractors yields larger

optimality gaps within ten seconds. One way-out are simplified reoptimization models. These compute a short-term dispatch containing only some of the requests: unknown future requests will influence future service anyway. The simpler the models the better the gaps, but also the larger the model error. What is more significant: reoptimization gap or reoptimization model error? We answer this question in simulations on real-world ADAC data: only the new model ZIBDIP dummy can keep up with ZIBDIP.

Report 04-18. Sascha G. Lukac. *Holes, Antiholes and Maximal Cliques in a Railway Model for a Single Track.*

Abstract: We present a graph theoretical model for scheduling trains on a single unidirectional track between two stations. The set of departures of all possible train types at all possible (discrete) points of time is turned into an undirected graph G by joining two nodes if the corresponding departures are in conflict. This graph G has no odd antiholes and no k -holes for any integer $k \geq 5$. In particular, any finite, node induced subgraph of G is perfect. For any integer $r \geq 2$ we construct minimal headways for r train types so that the resulting graph G has $2r$ -antiholes and 4-holes at the same time. Hence, G is neither a chordal graph nor the complement of a chordal graph, in general. At the end we analyse the maximal cliques in G .

Report 04-19. Tobias Achterberg. *SCIP - a framework to integrate Constraint and Mixed Integer Programming.*

Abstract: Constraint Programs and Mixed Integer Programs are closely related optimization problems originating from different scientific areas. Today's state-of-the-art algorithms of both fields have several strategies in common, in particular the branch-and-bound process to recursively divide the problem into smaller sub problems. On the other hand, the main techniques to process each sub problem are different, and it was observed that they have complementary strength. We present the programming framework *SCIP* that integrates techniques from both fields in order to exploit the strength of both, Constraint Programming and Mixed Integer Programming. In contrast to other proposals of recent years to combine both fields, *SCIP* does not focus on easy implementation and rapid prototyping, but is tailored towards expert users in need of full, in-depth control and high performance.

Report 04-20. Marc C. Steinbach. *Robust Process Control by Dynamic Stochastic Programming.*

Appeared in : Proc. Appl. Math. Mech. (4)1, (2004) 11-14

Abstract: Unnecessarily conservative behavior of standard process control techniques can be avoided by stochastic programming models when the distribution of random disturbances is known. In an earlier study we have investigated such an approach for tank level constraints of a distillation process. Here we address techniques that have accelerated the numerical solution of the large and expensive stochastic programs by a factor of six, and then present a refined optimization model for the same application.

Report 04-21. Klaus Ehrhardt; Marc C. Steinbach. *KKT Systems in Operative Planning for Gas Distribution Networks.*

Appeared in : Proc. Appl. Math. Mech. (4)1, (2004) 606-607

Abstract: Operative planning in gas networks with prescribed binary decisions yields large scale non-linear programs defined on graphs. We study the structure of the KKT systems arising in interior methods and present a customized direct solution algorithm. Computational results indicate that the algorithm is suitable for optimization in small and medium-sized gas networks.

Report 04-22. Dirk Draheim; Winfried Neun; Dima Suliman. *Searching and Classifying Differential Equations on the Web.*

Abstract: In this paper we describe the semantic analysis of differential equations given in the ubiquitous semi-structured formats MathML and OpenMath. The analysis is integrated in a deployed Web indexing framework. Starting from basic classifications for differential equations the proposed system architecture is amenable to extensions for further reconstruction of mathematical content on the Web. The syntactic analysis of mathematical formulae given in the considered formats must overcome ambiguities that stem from the fact that formula particles may have different encodings, which are in principle completely arbitrary. However, it turns out that the syntactic analysis can be done straightforward given some natural heuristic assumptions.

Report 04-23. Sebastian Orlowski; Roland Wessälly. *The Effect of Hop Limits on Optimal Cost in Survivable Network Design.*

Abstract: We investigate the impact of hop-limited routing paths on the total cost of a telecommunication network. For different survivability settings (dedicated protection, link and path restoration), the optimal network cost without restrictions on the admissible path set is compared to the results obtained with two strategies to impose hop limits on routing paths. In a thorough computational study on optimal solutions for nine real-world based problem instances, we show that hop limits should be

avoided if the technology allows it and network cost is a major planning issue. In this case, column generation should be employed to deal with all routing paths. If hop limits are required, these should be defined for each demand individually and as large as possible.

Report 04-24. Katja Braschoß; Sabine Hansmann; Thomas Hesse; Ulrike Joosten-Wilke; Ute Ristau; Beate Rusch; Viola Taylor. *Indexierung von Online-Katalogen: Ein gemeinsames Konzept der ALEPH-Anwender in Berlin.*

Zusammenfassung: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) verzichtet auf eine einheitliche zentrale Verbunddatenbank zugunsten einer dezentralen, verteilten Struktur. In dieser Architektur erhält die Art der Indexierung der angesprochenen Online-Kataloge eine besondere Bedeutung. So werden sowohl Bibliotheksmitarbeiter als auch Bibliotheksbenutzer immer wieder mit der Recherche in fremden Katalogen konfrontiert, in denen unterschiedliche Indexierungsverfahren realisiert sein können. Ein abgestimmtes Indexierungskonzept verfolgt zwei grundsätzliche Ziele. Einerseits soll durch eine vereinheitlichte Indexierung die Qualität und Zuverlässigkeit der Rechercheergebnisse in der parallelen Suche in mehreren Katalogen über die KOBV-Suchmaschine erhöht werden. Gleichzeitig soll durch eine vereinheitlichte Indexierung die Akzeptanz von Suchen in entfernten Katalogen prinzipiell gesteigert und damit die Bedingungen für die gegenseitige Übernahme von Titeldaten erleichtert werden. Für die Indexierung muss zunächst die Art und der Umfang der im OPAC aufzubauenen Indices festgelegt werden. Aus Sicht des Nutzers entspricht diese Definition den möglichen Sucheinstiegen. Hat man dann entschieden, welche Indexterme aus welchen Feldern in die jeweiligen Indices einfließen sollen, muss bestimmt werden, nach welchen Regeln die Terme behandelt werden. Hier stellt sich insbesondere das Problem der Sonderzeichen wie Bindestriche, Apostrophe und Punkte oder Ziffern in Zeichenketten. Das vorliegende Konzept entstand in Zusammenarbeit der großen Universitätsbibliotheken in Berlin (der Freien Universität, der Humboldt-Universität, der Technischen Universität, der Universität der Künste) mit der KOBV-Verbundzentrale am ZIB.

Report 04-25. Klaus Hildebrandt; Konrad Polthier. *Anisotropic Filtering of Non-Linear Surface Features.* Appeared in: Computer Graphics Forum - Eurographics Vol. 23 (2004) 3, Blackwell Publishing

Abstract: A new method for noise removal of arbitrary surfaces meshes is presented which focuses on the preservation and sharpening of non-linear geometric features such as curved surface regions and feature lines. Our method uses a prescribed mean curvature flow (PMC) for simplicial surfaces which is based on three new contributions: 1. the definition and efficient calculation of a discrete shape operator and principal curvature properties on simplicial surfaces that is fully consistent with the well-known discrete mean curvature formula, 2. an anisotropic discrete mean curvature vector that combines the advantages of the mean curvature normal with the special anisotropic behaviour along feature lines of a surface, and 3. an anisotropic prescribed mean curvature flow which converges to surfaces with an estimated mean curvature distribution and with preserved non-linear features. Additionally, the PMC flow prevents boundary shrinkage at constrained and free boundary segments.

Report 04-26. Felix Kälberer; Konrad Polthier; Ulrich Reitebuch; Max Wardetzky. *Compressing Triangle Meshes using Geometric Information.*

Abstract: We introduce FreeLance, a lossless single-rate connectivity compression algorithm for triangle surface meshes. Based upon a geometry-driven traversal scheme we present two novel and simple concepts: free-valence connectivity encoding and entropy coding based on geometric context. Together these techniques yield significantly smaller rates for connectivity compression than current state of the art approaches - valence-based algorithms and Angle-Analyzer, with an average of 36% improvement over the former and an average of 18% over the latter on benchmark 3D models, combined with the ability to well adapt to the regularity of meshes. We also prove that our algorithm exhibits a smaller worst case entropy for a class of "well-behaved" triangle meshes than valence-driven connectivity encoding approaches.

Report 04-27. Martin Weiser; Anton Schiela. *Function space interior point methods for PDE constrained optimization.*

Appeared in : PAMM 4 (1) 43-46 (2004)

Abstract: A primal-dual interior point method for optimal control problems with PDE constraints is considered. The algorithm is directly applied to the infinite dimensional problem. Existence and convergence of the central path are analyzed. Numerical results from an inexact continuation method applied to a model problem are shown.

Report 04-28. Lavinia Hodoroaba; Andres Imhof. *Das KOBV-Metadaten-Schema im KOBV-Portal.*

Zusammenfassung: Das KOBV-Metadaten-Schema ist von der KOBV-Zentrale entwickelt worden, um Ressourcen im Sinn von Informationskollektionen wie Datenbanken oder Fachportale zu beschrei-

ben. Es ist ein wichtiger Bestandteil des KOBV-Portals, das die in der Region verfügbaren Ressourcen nachweist. Das KOBV-Metadaten-Schema dient den Bibliotheken zur Handreichung, um dem KOBV-Portal die Ressourcen mit den standardisierten und individuellen Angaben zu melden, so dass die Ressourcebeschreibungen einem austauschbaren Format entsprechen. Auf diese Weise können Ressourcebeschreibungen von anderen Bibliotheken mitgenutzt werden und ein Metadata-Sharing in der Region Berlin-Brandenburg praktiziert werden, um in diesem Bereich doppelte Arbeiten zu sparen.

Report 04-29. Hans L. Bodlaender; Arie M. C. A. Koster; Thomas Wolle. *Contraction and Treewidth Lower Bounds*.

Appeared in: Proceedings of 12th Annual European Symposium on Algorithms (ESA), Bergen, Norway, 628-639 (2004)

Abstract: Edge contraction is shown to be a useful mechanism to improve lower bound heuristics for treewidth. A successful lower bound for treewidth is the degeneracy: the maximum over all subgraphs of the minimum degree. The degeneracy is polynomial time computable. We introduce the notion of contraction degeneracy: the maximum over all minors of the minimum degree. We show that the contraction degeneracy problem is NP-complete, even for bipartite graphs, but for fixed k , it is polynomial time decidable if a given graph G has contraction degeneracy at least k . Heuristics for computing the contraction degeneracy are proposed and evaluated. It is shown that these can lead in practice to considerable improvements of the lower bound for treewidth, but can perform arbitrarily bad on some examples. A study is also made for the combination of contraction with Lucena's lower bound based on Maximum Cardinality Search (Lucena, 2003). Finally, heuristics for the treewidth are proposed and evaluated that combine contraction with a treewidth lower bound technique by Clautiaux et al (2003).

Report 04-30. Joachim Lügger. *Zusammenarbeit mit vascoda im Rahmen des Verteilten Dokumentenservers (VDS)*.

Zusammenfassung: Die in der Arbeitsgemeinschaft der Verbundsysteme zusammengeschlossenen deutschen Verbundsysteme kooperieren zur Realisierung eines die Länder und Verbundregionen übergreifenden offenen Netzwerkes einer offenen digitalen Bibliothek, dem Verteilten Dokumentenserver (VDS). Wesentliche Bestandteile des VDS sind die in den lokalen Bibliotheken und Verbundsystemen verteilten Dokumentenspeicher. Beim Aufbau des VDS verfolgen die deutschen Verbundsysteme für ihre digitalen Ressourcen, Zeitschriften und Dokumente, folgende Ziele [AGV03]:

- Erhalt und dauerhafte Sicherung einmal erworbener Rechte
- Bessere Erschließung und Integration in das eigene Angebot
- Nahtlose Navigation in lokalen Zeitschriften- und Dokumentenservern und zwischen digitalen Artikeln und Zeitschriften, Dokumenten und Servern
- Dauerhafte Sicherung des Zugriffs und perspektivisch Langzeitverfügbarkeit

Die Verbundsysteme streben an, die Speicherung, Erschließung und das Angebot ihrer digitalen Materialien in einer nationalen Kooperation durchzuführen. Sie entwickeln und betreiben zu diesem Zweck Portal- und Querschnittstechnologien zur Integration ihrer dezentral gespeicherten digitalen Ressourcen mittels Internet-Technologien.

Report 04-31. Lavinia Hodoroba; Andres Imhof; Monika Kuberek. *Das KOBV-Portal, elektronische Ressourcen in Berlin-Brandenburg: Nachweis, parallele Suche und weiterführende Dienste*.

Appeared in: Bibliotheksdienst 38. Jg. (2004 H.), S. 1055

Zusammenfassung: Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) hat in den Jahren 2001 bis 2003 im Rahmen des Entwicklungsprojektes "KOBV-Informationsportal" ein regionales Portal aufgebaut, in dem integrierte Informationsdienste für die regionalen Bibliotheken zur Verfügung gestellt werden. Das "KOBV-Portal - Digitale Bibliothek Berlin-Brandenburg" wurde im Dezember 2003 in Betrieb genommen. Das KOBV-Portal bietet in seiner ersten Ausbaustufe den Nachweis über die in den großen Bibliotheken lizenzierten Ressourcen und elektronischen Zeitschriften, zudem die nahtlose Navigation mittels des Reference-Linking-Werkzeuges SFX zu verschiedenen Diensten wie Fernleihe, Subito und freien Volltexten im Internet sowie zu frei zugänglichen elektronischen Zeitschriften. Realisiert wurden ferner die Remote-Authentifizierung, mit der sich ein Nutzer, der online eine Fernleih-Bestellung aufgeben möchte, über das Internet in seiner Heimatbibliothek authentifizieren kann. Des Weiteren ist der Zugriff auf lizenzierte Bestände im Campus einer Hochschule mittels IP-Checking möglich. Als weiteren wesentlichen Bestandteil des KOBV-Portals hat die KOBV-Zentrale mit den Bibliotheken einen Workflow für ein Metadata-Sharing abgestimmt und für die Adaption und Normalisierung lokaler Metadaten aus lokalen Bibliothekssystemen und -Portalen den KOBV-Metadaten-Austausch-Parser (KMA-Parser) entwickelt. Damit Bibliotheken, deren Metadaten bislang lediglich

in unstrukturierter Form vorliegen, strukturierte Metadaten anlegen, liefern und nachnutzen können, hat die KOBV-Zentrale das mit einer Web-Katalogisierungsschnittstelle ausgestattete “Metadata-Tool” entwickelt. Die für das Metadata-Sharing entwickelten Komponenten und Module sollen den Bibliotheken die Mehrfacherfassung ersparen und ihnen die Möglichkeit der wechselseitigen Nachnutzung der Metadaten eröffnen. Der vorliegende Projekt-Abschlussbericht gibt einen Überblick über die während der Projektlaufzeit realisierten Dienste des KOBV-Portals.

Report 04-32. Tobias Harks. *Utility Proportional Fair Bandwidth Allocation - An Optimization Oriented Approach.*

Abstract: In this paper we present a novel approach to the congestion control and resource allocation problem of elastic and real-time traffic in telecommunication networks. With the concept of utility functions, where each source uses a utility function to evaluate the benefit from achieving a transmission rate, we interpret the resource allocation problem as a global optimization problem. The solution to this problem is characterized by a new fairness criterion, *utility proportional fairness*. We argue that it is an application level performance measure, i.e. the utility that should be shared fairly among users. As a result of our analysis, we obtain congestion control laws at links and sources that are globally stable and provide a utility proportional fair resource allocation in equilibrium. We show that a utility proportional fair resource allocation also ensures utility max-min fairness for all users sharing a single path in the network. As a special case of our framework, we incorporate utility max-min fairness for the entire network. To implement our approach, neither per-flow state at the routers nor explicit feedback beside ECN (Explicit Congestion Notification) from the routers to the end-systems is required.

Report 04-33. Vladimir V. Sokolov; Thomas Wolf. *Integrable quadratic Hamiltonians on $so(4)$ and $so(3,1)$.*

Abstract: We investigate a special class of quadratic Hamiltonians on $so(4)$ and $so(3,1)$ and describe Hamiltonians that have additional polynomial integrals. One of the main results is a new integrable case with an integral of sixth degree.

Report 04-34. Brigitte Lutz-Westphal. *Unterrichtsideen zu Algorithmen der kombinatorischen Optimierung.*

Zusammenfassung: Im Rahmen von Problemstellungen der kombinatorischen Optimierung können Schülerinnen und Schüler lernen, Algorithmen selber zu entwickeln. Gleichzeitig lernen sie dabei moderne Mathematik in ihren Anwendungen kennen und erleben die Mathematik als lebendige Wissenschaft.

Report 04-35. Brigitte Lutz-Westphal. *Wie komme ich optimal zum Ziel? Unterricht über kürzeste-Wege-Algorithmen für Graphen.*

Zusammenfassung: Kürzeste Wege tauchen fast überall im Alltag auf. Daher eignet sich dieses Optimierungsproblem gut für den Unterricht. Modellierung und heuristische Vorgehensweisen werden geübt, um schließlich die klassischen kürzesten Wege-Algorithmen selbst zu erfinden. In diesem Artikel werden die Inhalte vorgestellt und konkrete Hinweise zum Unterricht in der Schule gegeben.

Report 04-36. Brigitte Lutz-Westphal. *Die Mathematik der kürzesten Wege. Inhalte und Methoden für den Unterricht.*

Zusammenfassung: Wie findet man den optimalen Weg im U-Bahnnetz? Das Problem wird als Graph modelliert und dann eine Breitensuche durchgeführt. Will man Weglängen oder Fahrzeiten mitberücksichtigen, so braucht man den Algorithmus von Dijkstra für gewichtete Graphen. Beim Nachdenken über diese Algorithmen werden auch Fragestellungen der Graphentheorie berührt. In einem zweiten Abschnitt werden methodische Hinweise für den Unterricht in der Sekundarstufe I und II gegeben, insbesondere, wie man Lernende dazu bringen kann, ihre Ideen für Algorithmen präzise zu analysieren und zu Papier zu bringen.

Report 04-37. Michael Joswig; Marc E. Pfetsch. *Computing Optimal Morse Matchings.*

Abstract: Morse matchings capture the essential structural information of discrete Morse functions. We show that computing optimal Morse matchings is NP-hard and give an integer programming formulation for the problem. Then we present polyhedral results for the corresponding polytope and report on computational results.

Report 04-38. Martin Weiser; Tobias Gänzler; Anton Schiela. *A Control Reduced Primal Interior Point Method for PDE Constrained Optimization.*

Abstract: A primal interior point method for control constrained optimal control problems with PDE constraints is considered. Pointwise elimination of the control leads to a homotopy in the remaining state and dual variables, which is addressed by a short step pathfollowing method. The algorithm is applied to the continuous, infinite dimensional problem, where discretization is performed only in the innermost loop when solving linear equations. The a priori elimination of the least regular control permits to obtain the required accuracy with comparable coarse meshes. Convergence of the method and discretization errors are studied, and the method is illustrated at two numerical examples.

Report 04-39. Marcus Weber; Wasinee Rungsarityotin; Alexander Schliep. *Perron Cluster Analysis and Its Connection to Graph Partitioning for Noisy Data.*

Abstract: The problem of clustering data can be formulated as a graph partitioning problem. Spectral methods for obtaining optimal solutions have received a lot of attention recently. We describe Perron Cluster Cluster Analysis (PCCA) and, for the first time, establish a connection to spectral graph partitioning. We show that in our approach a clustering can be efficiently computed using a simple linear map of the eigenvector data. To deal with the prevalent problem of noisy and possibly overlapping data we introduce the min Chi indicator which helps in selecting the number of clusters and confirming the existence of a partition of the data. This gives a non-probabilistic alternative to statistical mixture-models. We close with showing favorable results on the analysis of gene expression data for two different cancer types.

Report 04-40. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka. *Provably Good Solutions for Wavelength Assignment in Optical Networks.*

Appeared in: Proceeding of ONDM 2005, the 9th IFIP Working Conference on Optical Network Design and Modelling, February 7-9, 2004, Milan, Italy

Abstract: In this paper we study the minimum converter wavelength assignment problem in optical networks. To benchmark the quality of solutions obtained by heuristics, we derive an integer programming formulation by generalizing the formulation of Mehrotra and Trick (1996) for the vertex coloring problem. To handle the exponential number of variables, we propose a column generation approach. Computational experiments show that the value of the linear relaxation states a good lower bound and can often prove optimality of the best solution generated heuristically.

Report 04-41. Arie M.C.A. Koster; Adrian Zymolka. *Linear Programming Lower Bounds for Minimum Converter Wavelength Assignment in Optical Networks.*

Appeared in: Proceeding of INOC 2005, International Network Optimization Conference, March 20-23, 2005 Lissabon, Portugal

Abstract: In this paper we study the conflict-free assignment of wavelengths to lightpaths in an optical network with the opportunity to place wavelength converters. To benchmark heuristics for the problem, we develop integer programming formulations and study their properties. Moreover, we study the computational performance of the column generation algorithm for solving the linear relaxation of the most promising formulation. In many cases, a non-zero lower bound on the number of required converters is generated this way. For several instances, we in fact prove optimality since the lower bound equals the best known solution value.

Report 04-42. Thorsten Koch; Roland Wessály. *Hierarchical Infrastructure Planning in Networks.*

Abstract: In this article, strategical infrastructure planning problems in the design of large-scale telecommunication networks are discussed based on experiences from three projects with industrial partners: The access network planning of the German Gigabit-Wissenschaftsnetz (G-WiN) for DFN (Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e.V.), the mobile network switching center location planning project for E-Plus Mobilfunk, and the fixed network switching center location planning project for TELEKOM AUSTRIA. We introduce a mathematical model for a hierarchical multi-commodity capacitated facility location problem, present adaptations of this basic model to the specific requirements within the different projects and discuss the individual peculiarities and model decisions made. Eventually, we present and discuss computational results of three associated case studies, illustrating “how we did the job” with mathematical methods.

Report 04-43. Thomas Wolle; Arie M.C.A. Koster; Hans L. Bodlaender. *A Note on Contraction Degeneracy.*

Abstract: The parameter contraction degeneracy – the maximum minimum degree over all minors of a graph – is a treewidth lower bound and was first defined in (Bodlaender, Koster, Wolle, 2004). In experiments it was shown that this lower bound improves upon other treewidth lower bounds. In this note, we examine some relationships between the contraction degeneracy and connected components of a graph, blocks of a graph and the genus of a graph. We also look at chordal graphs, and we study an upper bound on the contraction degeneracy and another lower bound for treewidth. A data structure that can be used for algorithms computing the degeneracy and similar parameters, is also described.

Report 04-44. Arie M.C.A. Koster; Thomas Wolle; Hans L. Bodlaender. *Degree-Based Treewidth Lower Bounds.*

Abstract: Every lower bound for treewidth can be extended by taking the maximum of the lower bound over all subgraphs or minors. This extension is shown to be a very vital idea for improving treewidth lower bounds. In this paper, we investigate a total of nine graph parameters, providing lower bounds for treewidth. The parameters have in common that they all are the vertex-degree of some vertex in a

subgraph or minor of the input graph. We show relations between these graph parameters and study their computational complexity. To allow a practical comparison of the bounds, we developed heuristic algorithms for those parameters that are NP-hard to compute. Computational experiments show that combining the treewidth lower bounds with minors can considerably improve the lower bounds.

Report 04-45. Hans L. Bodlaender; Arie M.C.A. Koster. *On the Maximum Cardinality Search Lower Bound for Treewidth.*

An extended abstract appeared in: Proceedings of International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science, WG 2004, Lecture Notes in Computer Science 3353, 2005, 81-92

Abstract: The Maximum Cardinality Search algorithm visits the vertices of a graph in some order, such that at each step, an unvisited vertex that has the largest number of visited neighbors becomes visited. An MCS-ordering of a graph is an ordering of the vertices that can be generated by the Maximum Cardinality Search algorithm. The visited degree of a vertex v in an MCS-ordering is the number of neighbors of v that are before v in the ordering. The visited degree of an MCS-ordering ψ of G is the maximum visited degree over all vertices v in ψ . The maximum visited degree over all MCS-orderings of graph G is called its *maximum visited degree*. Lucena (2003) showed that the treewidth of a graph G is at least its maximum visited degree. We show that the maximum visited degree is of size $O(\log n)$ for planar graphs, and give examples of planar graphs G with maximum visited degree k with $O(k!)$ vertices, for all $k \in \mathbb{N}$. Given a graph G , it is NP-complete to determine if its maximum visited degree is at least k , for any fixed $k \geq 7$. Also, this problem does not have a polynomial time approximation algorithm with constant ratio, unless $P=NP$. Variants of the problem are also shown to be NP-complete. We also propose and experimentally analyse some heuristics for the problem. Several tiebreakers for the MCS algorithm are proposed and evaluated. We also give heuristics that give upper bounds on the value of the maximum visited degree of a graph, which appear to give results close to optimal on many graphs from real life applications.

Report 04-46. Marc C. Steinbach. *On PDE Solution in Transient Optimization of Gas Networks.*

Abstract: Operative planning in gas distribution networks leads to large-scale mixed-integer optimization problems involving a hyperbolic PDE defined on a graph. We consider the NLP obtained under prescribed combinatorial decisions—or as relaxation in a branch and bound framework, addressing in particular the KKT systems arising in primal-dual interior methods. We propose a custom solution algorithm using sparse local projections, based on the KKT systems' structural properties induced by the discretized gas flow equations in combination with the underlying network topology. The numerical efficiency and accuracy of the algorithm are investigated, and detailed computational comparisons with a control space method and with the multifrontal solver MA27 are provided.

Report 04-47. Uwe Prüfert; Fredi Tröltzsch; Martin Weiser. *The convergence of an interior point method for an elliptic control problem with mixed control-state constraints.*

Abstract: The paper addresses primal interior point method for state constrained PDE optimal control problems. By a Lavrentiev regularization, the state constraint is transformed to a mixed control-state constraint with bounded Lagrange multiplier. Existence and convergence of the central path are established, and linear convergence of a short-step pathfollowing method is shown. The behaviour of the regularizations is demonstrated by numerical examples.

Report 04-48. Jens Burgschweiger; Bernd Gnädig; Marc C. Steinbach. *Optimization Models for Operative Planning in Drinking Water Networks.*

Abstract: The topic of this paper is minimum cost operative planning of pressurized water supply networks over a finite horizon and under reliable demand forecast. Since this is a very hard problem, it is desirable to employ sophisticated mathematical algorithms, which in turn calls for carefully designed models with suitable properties. The paper develops a nonlinear mixed integer model and a nonlinear programming model with favorable properties for gradient-based optimization methods, based on smooth component models for the network elements. In combination with further nonlinear programming techniques (to be reported elsewhere), practically satisfactory near-optimum solutions even for large networks can be generated in acceptable time using standard optimization software on a PC workstation. Such an optimization system is in operation at Berliner Wasserbetriebe.

Report 04-49. Sebastian Orłowski; Roland Wessälly. *An Integer Programming Model for Multi-Layer Network Design.*

Abstract: We present an integer linear programming model for the design of multi-layer telecommunication networks which are based on connection-oriented routing protocols. The formulation integrates hardware, capacity, routing, and grooming decisions in any number of network layers. Practical hardware restrictions and cost can accurately be taken into account.

Report 04-50. Reinhard Hochmuth. *Homogenization for a Nonlocal Coupling Model.*

Abstract: In homogenization techniques are applied to derive an anisotropic variant of the bio-heat transfer equation as asymptotic result of boundary value problems providing a microscopic description for microvascular tissue. In view of a future application on treatment planning in hyperthermia, we investigate here the homogenization limit for a coupling model, which takes additionally into account the influence of convective heat transfer in medium size blood vessels. This leads to second order elliptic boundary value problems with nonlocal boundary conditions on parts of the boundary. Moreover, we present asymptotic estimates for first order correctors.

Report 04-51. Timm Baumeister; Frank Cordes. *A new Model for the Free Energy of Solvation and its Application in Protein Ligand Scoring.*

Abstract: A new and time efficient model to evaluate the free energy of solvation has been developed. The solvation free energy is separated into an electrostatic term, a hydrogen bond term, and a rest-term, combining both entropic and van der Waals effects. The electrostatic contribution is evaluated with a simplified boundary element method using the partial charges of the MMFF94 force field. The number of hydrogen bonds and the solvent excluded surface area over the surface atoms are used in a linear model to estimate the non-electrostatic contribution. This model is applied to a set of 213 small and mostly organic molecules, yielding an rmsd of 0.87kcal/mol and a correlation with experimental data of $r=0.951$. The model is applied as a supplementary component of the free energy of binding to estimate binding constants of protein ligand complexes. The intermolecular interaction energy is evaluated by using the MMFF94 force field.

Report 04-52. Daniel Baum. *Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules.*

Abstract: In this paper we describe a new algorithm for multiple semi-flexible superpositioning of drug-sized molecules. The algorithm identifies structural similarities of two or more molecules. When comparing a set of molecules on the basis of their three-dimensional structures, one is faced with two main problems. (1) Molecular structures are not fixed but flexible, i.e., a molecule adopts different forms. To address this problem, we consider a set of conformers per molecule. As conformers we use representatives of conformational ensembles, generated by the program ZIBMol. (2) The degree of similarity may vary considerably among the molecules. This problem is addressed by searching for similar substructures present in arbitrary subsets of the given set of molecules. The algorithm requires to preselect a reference molecule. All molecules are compared to this reference molecule. For this pairwise comparison we use a two-step approach. Clique detection on the correspondence graph of the molecular structures is used to generate start transformations, which are then iteratively improved to compute large common substructures. The results of the pairwise comparisons are efficiently merged using binary matching trees. All common substructures that were found, whether they are common to all or only a few molecules, are ranked according to different criteria, such as number of molecules containing the substructure, size of substructure, and geometric fit. For evaluating the geometric fit, we extend a known scoring function by introducing weights which allow to favor potential pharmacophore points. Despite considering the full atomic information for identifying multiple structural similarities, our algorithm is quite fast. Thus it is well suited as an interactive tool for the exploration of structural similarities of drug-sized molecules.

Report 04-53. Hartwig Bosse; Martin Grötschel; Martin Henk. *Polynomial Inequalities Representing Polyhedra.*

Abstract: Our main result is that every n -dimensional polytope can be described by at most $2n-1$ polynomial inequalities and, moreover, these polynomials can explicitly be constructed. For an n -dimensional pointed polyhedral cone we prove the bound $2n-2$ and for arbitrary polyhedra we get a constructible representation by $2n$ polynomial inequalities.

Report 04-54. Lavinia Hodoroaba; Andres Imhof; Markus Malo. *Das Profil des KOBV-Portals.*

Zusammenfassung: Zahlreiche lokale, nationale und internationale Informationsportale existieren mit zum Teil gleichen Angeboten und Dienstleistungen nebeneinander. Da der Aufbau und Betrieb von Portalen kostspielig ist, sollten die einzelnen Dienstleistungen abgestimmt und sinnvoll untereinander vernetzt werden. Für eine solch anzustrebende Kooperation unter Portalen ist es notwendig, ein jeweils eigenes Portalprofil zu definieren, um bei einer Gegenüberstellung der Profile die Abgrenzungen und Verknüpfungspunkte deutlich werden zu lassen. Die KOBV-Zentrale möchte mit der Profilbeschreibung des KOBV-Portals beginnen und so die eigenen Angebote des regionalen Portals mit denen anderer auf sinnvolle Weise verknüpfen. Für diese Positionsbestimmung werden die Dienstleistungen, die Zielgruppe, die Kriterien für die Ressourcenauswahl sowie die Abgrenzung zu anderen Portalen dargelegt.

Report 04-55. Zara Kanaeva. *Ranking: Google und CiteSeer.*

Zusammenfassung: Im Rahmen des klassischen Information Retrieval wurden verschiedene Verfahren für das Ranking sowie die Suche in einer homogenen strukturlosen Dokumentenmenge entwickelt. Die Erfolge der Suchmaschine Google haben gezeigt, dass die Suche in einer zwar inhomogenen aber zusammenhängenden Dokumentenmenge wie dem Internet unter Berücksichtigung der Dokumentenverbindungen (Links) sehr effektiv sein kann. Unter den von der Suchmaschine Google realisierten Konzepten ist ein Verfahren zum Ranking von Suchergebnissen (PageRank), das in diesem Artikel kurz erklärt wird. Darüber hinaus wird auf die Konzepte eines Systems namens CiteSeer eingegangen, welches automatisch bibliographische Angaben indiziert (engl. „Autonomous Citation Indexing“, ACI). Letzteres erzeugt aus einer Menge von nicht-vernetzten wissenschaftlichen Dokumenten eine zusammenhängende Dokumentenmenge und ermöglicht den Einsatz von Ranking-Verfahren, die auf den von Google genutzten Verfahren basieren.

Report 04-56. Zara Kanaeva. *Verteilter Dokumenten Speicher: Erfahrungen mit der Suchmaschine Fast.*

Zusammenfassung: In diesem Bericht wurden Erfahrungen mit der Suchmaschine FAST im Rahmen des Projektes Verteilter Contentspeicher sowie die Suchmaschine FAST beschrieben. Das Ziel des Projektes Verteilter Contentspeicher war die Speicherung, Erschließung und das Angebot der digitalen Bestände der Journale und Dokumente der KOBV-Bibliotheken zu ermöglichen. Die Eignung der Suchmaschine FAST für das Projektvorhaben wurde systematisch und gründlich getestet, indem verschiedene Dokumentmengen mit FAST indiziert wurden.

Report 04-57. Hubert Busch. *Abschlußbericht des DFN-Projekts „Virtueller Supercomputer Berlin - Hannover“.*

Zusammenfassung: Mit der Installation des neuen Hochleistungsrechners für die norddeutschen Länder (HLRN) steht den Wissenschaftlern ein außergewöhnlich leistungsfähiges System zur Verfügung. Durch die Verteilung der Rechenelemente auf zwei verschiedene Standorte in Berlin (ZIB) und Hannover (RRZN) entstehen jedoch auch neue Herausforderungen für den Betrieb und die effiziente Nutzung des Rechners. Inhalt dieses Projektes ist die Erforschung und Lösung der durch die Verteilung des Systems hervorgerufenen Probleme (z.B. Scheduling, Kommunikation, I/O). Es werden effiziente Lösungen zur Bereitstellung eines virtuellen, hoch-performanten und transparenten Systems entwickelt, die auf vergleichbare Installationen übertragbar sind.

Report 04-58. Thorsten Koch. *Rapid Mathematical Programming.*

Abstract: The thesis deals with the implementation and application of out-of-the-box tools in linear and mixed integer programming. It documents the lessons learned and conclusions drawn from five years of implementing, maintaining, extending, and using several computer codes to solve real-life industrial problems. By means of several examples it is demonstrated how to apply algebraic modeling languages to rapidly devise mathematical models of real-world problems. It is shown that today's MIP solvers are capable of solving the resulting mixed integer programs, leading to an approach that delivers results very quickly. Even though, problems are tackled that not long ago required the implementation of specialized branch-and-cut algorithms. In the first part of the thesis the modeling language Zimpl is introduced. Chapter 2 contains a complete description of the language. In the subsequent chapter details of the implementation are described. Both theoretical and practical considerations are discussed. Aspects of software engineering, error prevention, and detection are addressed. In the second part several real-world projects are examined that employed the methodology and the tools developed in the first part. Chapter 4 presents three projects from the telecommunication industry dealing with facility location problems. Chapter 5 characterizes questions that arise in UMTS planning. Problems, models, and solutions are discussed. Special emphasis is put on the dependency of the precision of the input data and the results. Possible reasons for unexpected and undesirable solutions are explained. Finally, the Steiner tree packing problem in graphs, a well-known hard combinatorial problem, is revisited. A formerly known, but not yet used model is applied to combine switchbox wire routing and via minimization. All instances known from the literature are solved by this approach, as are some newly generated bigger problem instances.

